

I. GROSU

FIZICA STĂRII CONDENSATE

*Funcții de răspuns
și efecte de dezordine*



Presa Universitară Clujeană

I. GROSU

FIZICA STĂRII CONDENSATE

Funcții de răspuns și efecte de dezordine

Capitolul I

FUNCTII DE CORELAȚIE ȘI RĂSPUNS

Multe dintre mărimile observate în natură sînt fie dependente de timp fie dependente de frecvență. În acest capitol vom introduce limbajul necesar pentru a descrie fenomenele dependente de timp și de frecvență din sistemele condensate care se află în apropierea stării de echilibru. O să ne concentrăm atenția asupra corelațiilor dinamice și a răspunsului liniar la acțiunea cîmpurilor externe dependente de timp. Dependența de timp a variabilelor dinamice, atît clasice cît și cuantice, este guvernată de ecuații de mișcare determinate de hamiltonianul H . Un operator cuantic (sau cîmp) $\phi_i(\vec{x}, t)$ evoluează în timp, în reprezentarea Heisenberg, în acord cu:

$$\phi_i(\vec{x}, t) = e^{iHt/\hbar} \cdot \phi_i(\vec{x}, 0) \cdot e^{-iHt/\hbar} \quad (1.1)$$

Deoarece adesea sîntem interesați mai degrabă în dependența de frecvență decît în dependența de timp a operatorilor, vom introduce transformatele Fourier temporale:

$$\phi_i(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} \cdot \phi_i(\vec{x}, \omega) \quad (1.1)$$

$$\phi_i(\vec{x}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \cdot \phi_i(\vec{x}, t) \quad (1.2)$$

Adesea vom studia corelațiile dependente de timp a unor variabile ca poziția $\vec{x}^\alpha(t)$ a particulei α sau funcții simple a acestor variabile, cum ar fi densitatea:

$$n(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha} \delta(\vec{x} - \vec{x}^\alpha(t)) \quad (1.3)$$

Aici, atît $n(\vec{x}, t)$ cît și $\vec{x}^\alpha(t)$ evoluează în acord cu ec.(1.1). În cazul clasic operatorii $\vec{x}^\alpha(t)$ evoluează în acord cu legile lui Newton.

Definim funcțiile de corelație dependente de timp prin:

$$C_{\phi_i, \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \langle \phi_i(\vec{x}, t) \phi_j(\vec{x}', t') \rangle \quad (1.4)$$

și:

$$S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \langle (\phi_i(\vec{x}, t) - \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle) (\phi_j(\vec{x}', t') - \langle \phi_j(\vec{x}', t') \rangle) \rangle = \\ = C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') - \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle \langle \phi_j(\vec{x}', t') \rangle \quad (1.5)$$

unde $\langle \dots \rangle$ înseamnă medierea pe un ansamblu de echilibru. Când $t = t'$, funcțiile de corelare se reduc la funcțiile de corelare statice:

$$C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t) \equiv C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}') \\ S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t) \equiv S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}') \quad (1.6)$$

În afară de cazuri bine precizate, vom considera numai hamiltonieni care nu depind de timp, astfel încît toate medierile termodinamice rămîn invariante în raport cu translațiile temporale. Aceasta implică că $\langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle \equiv \langle \phi_i(\vec{x}) \rangle$ este independentă de timp și că funcțiile de corelare $C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$ și $S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$ depind numai de diferența $t - t'$ mai degrabă decît de t și t' individual. Astfel, funcția de corelare pentru cazul variabilelor care rezultă prin transformata Fourier temporală poate fi scrisă:

$$\langle \phi_i(\vec{x}, \omega) \phi_j(\vec{x}', \omega') \rangle = C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) \cdot 2\pi \delta(\omega + \omega') \quad (1.7)$$

unde:

$$C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') \cdot e^{i\omega(t-t')} \cdot C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') \quad (1.8)$$

Pentru a obține expresiile (1.7) și (1.8) scriem:

$$\langle \phi_i(\vec{x}, \omega) \phi_j(\vec{x}', \omega') \rangle = \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot dt' \cdot \phi_i(\vec{x}, t) \phi_j(\vec{x}', t') \cdot e^{i\omega t} e^{i\omega' t'} \right\rangle = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot dt' \cdot e^{i\omega t} e^{i\omega' t'} \langle \phi_i(\vec{x}, t) \phi_j(\vec{x}', t') \rangle = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') \cdot dt' \cdot e^{i\omega(t-t')} e^{i\omega' t'} e^{i\omega t'} \cdot C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') \cdot e^{i\omega(t-t')} \cdot C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') \int_{-\infty}^{\infty} dt' \cdot e^{i(\omega + \omega')t'} = \\ = C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) \cdot 2\pi \delta(\omega + \omega')$$

Funcția de corelare $C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$ se numește adesea și spectrul putere a lui $\phi_i(\vec{x}, t)$.

În mod similar definim:

$$S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') \cdot e^{i\omega(t-t')} \cdot S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') \quad (1.9)$$

Ecuția (1.5) implică:

$$C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) + \langle \phi_i(\vec{x}) \rangle \langle \phi_j(\vec{x}') \rangle \cdot 2\pi \delta(\omega) \quad (1.10)$$

și ne arată că $\langle \phi_i(\vec{x}) \rangle \langle \phi_j(\vec{x}') \rangle$ contribuie numai la partea statică (de frecvență zero) a lui $C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$.

Pentru a justifica relația (1.10) scriem:

$$C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') = S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') + \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle \langle \phi_j(\vec{x}', t') \rangle$$

cu:

$$C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \cdot e^{i\omega\tau} \cdot C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \tau), \quad \tau = t - t'$$

și:

$$C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$$

$$S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$$

În plus:

$$\langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle = \langle \phi_i(\vec{x}) \rangle \quad \langle \phi_j(\vec{x}', t') \rangle = \langle \phi_j(\vec{x}') \rangle$$

Atunci:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot C_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) +$$

$$+ \langle \phi_i(\vec{x}) \rangle \langle \phi_j(\vec{x}') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot S_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) +$$

$$+ \langle \phi_i(\vec{x}) \rangle \langle \phi_j(\vec{x}') \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot 2\pi \delta(\omega) \cdot e^{-i\omega\tau}$$

Imediat rezultă că:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot C_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot 2\pi\delta(\omega) \cdot e^{-i\omega\tau} \cdot \langle\phi_i(\vec{x})\rangle \langle\phi_j(\vec{x}')\rangle$$

sau:

$$C_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) + \langle\phi_i(\vec{x})\rangle \langle\phi_j(\vec{x}')\rangle \cdot 2\pi\delta(\omega)$$

Funcții de răspuns

Funcția de răspuns dinamică $\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$ leagă modificarea mediei câmpurilor dependente de timp $\delta\langle\phi_i(\vec{x}, t)\rangle$ cu modificarea dependentă de timp $\delta h_j(\vec{x}', t')$ a câmpurilor exterioare:

$$\delta\langle\phi_i(\vec{x}, t)\rangle = \int d^d x' \cdot dt' \cdot \tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') \cdot \delta h_j(\vec{x}', t') \quad (1.11)$$

Aici este important să recunoaștem diferența între variabilele temporale și spațiale din ecuație. Perturbațiile din \vec{x}' pot conduce la modificări în $\langle\phi_i(\vec{x}, t)\rangle$ în toate punctele \vec{x} . Perturbațiile la momentul t' pot conduce la modificări în $\langle\phi_i(\vec{x}, t)\rangle$ numai pentru momente de timp t ulterioare lui t' , altfel spus, răspunsul lui $\langle\phi_i(\vec{x}, t)\rangle$ la acțiunea lui $h_j(\vec{x}', t')$ este **cauzal**. Aceasta înseamnă că funcția de răspuns $\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$ poate fi diferită de zero numai pentru $t > t'$. Este deci folositor să încorporăm această dependență de tip funcție treaptă în timp, în definiția funcției de răspuns, scriind:

$$\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = 2i\eta(t - t') \cdot \tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t, t') \quad (1.12)$$

unde:

$$\eta(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{pentru } t > t' \\ 0 & \text{pentru } t < t' \end{cases} \quad (1.13)$$

este funcția treaptă Heaviside. Factorul $2i$ ($i = \sqrt{-1}$), în momentul de față, este arbitrar, fiind introdus pentru simplificări ulterioare. Ec.(1.12) poate fi

privită ca definiția lui $\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$, care este pur imaginar dacă atât ϕ_i cât și ϕ_j sînt reali. Din nou, invarianța la translații temporale implică că $\tilde{\chi}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$ și $\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$ depind numai de $t - t'$.

Vom discuta în cele ce urmează unele proprietăți analitice a funcției de răspuns și a transformatei ei Fourier în raport cu timpul. Pentru a menține notațiile compacte, vom considera răspunsul unui câmp independent de poziție $\phi(t)$ la câmpul exterior conjugat $h(t)$. În acest caz avem:

$$\delta \langle \phi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \cdot \tilde{\chi}(t - t') \cdot \delta h(t') \quad (1.14)$$

unde $\tilde{\chi}(t) = 2i\eta(t)\tilde{\chi}''(t)$. Atît $\langle \phi(t) \rangle$ cât și $h(t)$ sînt reale astfel încît $\tilde{\chi}''(t)$ este pur imaginar. Sîntem interesați în răspuns ca funcție de frecvență mai degrabă decît ca funcție de timp. Atunci va trebui să calculăm transformata Fourier temporală pentru $\tilde{\chi}(t)$. Datorită factorului cauzal de tip funcție treaptă în $\tilde{\chi}(t)$, este folositor să introducem transformata Laplace ca funcție de frecvență complexă z :

$$\chi(z) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{izt} \cdot \tilde{\chi}(t) \cdot dt = \int_0^{\infty} e^{izt} \cdot \tilde{\chi}(t) \cdot dt \quad (1.15)$$

Deoarece t este pozitiv, $\chi(z)$ este **analitică în semiplanul superior z** . Definim transformata Fourier în raport cu variabila frecvență reală:

$$\tilde{\chi}''(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} \cdot \chi''(\omega)$$

$$\chi''(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \cdot \tilde{\chi}''(t) \quad (1.16)$$

Dacă $\tilde{\chi}''(t)$ tinde către o constantă cînd $t \rightarrow \infty$, atunci $\chi''(\omega)$ va conține părți de tip funcție δ . În urma unor argumente care vor fi discutate ulterior,

$$\tilde{\chi}''(t) = -\tilde{\chi}''(-t)$$

Aceasta, împreună cu faptul că $\tilde{\chi}''(t)$ este pur imaginar, implică că $\chi''(\omega)$ este **real și impar** în ω . Ecuațiile (1.12), (1.15) și (1.16) implică:

$$\chi(z) = \int_0^{\infty} dt \cdot e^{izt} \cdot 2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} \cdot \chi''(\omega)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\omega)}{\omega - z} \quad (1.17)$$

pentru z în semiplanul superior. Această reprezentare pentru $\chi(z)$ arată clar că avem singularități pe axa reală, astfel încât $\chi(z)$ este analitică în semiplanul superior.

Justificarea relației (1.17) se face astfel: Știm că:

$$\tilde{\chi}(t) = 2i\eta(t) \cdot \tilde{\chi}''(t)$$

și:

$$\chi(z) = \int_0^{\infty} e^{izt} \cdot \tilde{\chi}(t) \cdot dt$$

Atunci:

$$\begin{aligned} \chi(z) &= \int_0^{\infty} e^{izt} \cdot 2i\eta(t) \cdot \tilde{\chi}''(t) \cdot dt = \int_0^{\infty} e^{izt} \cdot 2i \cdot \tilde{\chi}''(t) \cdot dt = \\ &= \int_0^{\infty} dt \cdot e^{izt} \cdot 2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} \cdot \chi''(\omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \chi''(\omega) \int_0^{\infty} dt \cdot e^{-i(\omega-z)t} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\omega)}{\omega - z}, \quad \text{Im } z > 0 \end{aligned}$$

Funcția de răspuns dependentă de timp $\tilde{\chi}(t)$ este transformata Laplace inversă a lui $\chi(z)$, care în acest caz este o integrală de-a lungul unui contur situat în semiplanul superior:

$$\tilde{\chi}(t) = \int_{-\infty+ic}^{\infty+ic} \frac{dz}{2\pi} \cdot e^{-izt} \cdot \chi(z) \quad (1.18)$$

unde c este un număr real pozitiv oarecare. Dacă $t > 0$, conturul $[-\infty + ic, \infty + ic]$ poate fi închis prin semiplanul inferior, existînd o contribuție la integrală provenind de la $z = \omega$. Dacă $t < 0$, conturul poate fi închis prin semiplanul superior unde $\chi(z)$ este zero. Astfel $\tilde{\chi}(t)$ este zero pentru $t < 0$ și egală cu $2i\tilde{\chi}''(t)$ pentru $t > 0$.

Funcția de răspuns $\chi(\omega)$, care leagă $\delta\langle\phi(\omega)\rangle$ cu $\delta h(\omega)$ poate fi obținută folosind reprezentarea Fourier:

$$\eta(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \cdot e^{i\omega t} \cdot \frac{1}{\omega - i\epsilon} \quad (1.19)$$

pentru funcția treaptă. De aici și cu ec.(1.14) obținem:

$$\begin{aligned}\delta \langle \phi(\omega) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \cdot 2i\eta(t-t') \cdot \tilde{\chi}''(t-t') \cdot \delta h(t') = \\ &= \chi(\omega) \cdot \delta h(\omega)\end{aligned}\quad (1.20)$$

cu:

$$\chi(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi(\omega + i\epsilon) \quad (1.21)$$

unde $\chi(\omega + i\epsilon)$ este dată de ec.(1.17) cu $z = \omega + i\epsilon$.

Pentru a justifica relațiile (1.20) și (1.21) pornim de la:

$$\delta \langle \phi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \cdot \tilde{\chi}(t-t') \cdot \delta h(t')$$

și folosim:

$$\tilde{\chi}(t-t') = 2i\eta(t-t') \tilde{\chi}''(t-t')$$

avînd:

$$\delta \langle \phi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \cdot 2i\eta(t-t') \cdot \tilde{\chi}''(t-t') \cdot \delta h(t')$$

Integrînd după t această expresie, obținem:

$$\delta \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \cdot \phi(t) \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \cdot 2i\eta(t-t') \cdot \tilde{\chi}''(t-t') \cdot \delta h(t')$$

sau:

$$\begin{aligned}\delta \langle \phi(\omega) \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \cdot 2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\omega}}{2\pi i} \cdot \frac{e^{i\bar{\omega}(t-t')}}{\bar{\omega} - i\epsilon} \cdot \\ &\cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot e^{-i\omega'(t-t')} \cdot \chi''(\omega') \cdot \delta h(t')\end{aligned}$$

care se rescrie în felul următor:

$$\begin{aligned}\delta \langle \phi(\omega) \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \cdot e^{i\omega t'} \cdot \delta h(t') \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \cdot e^{i\omega(t-t')} \cdot \\ &\cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\omega}}{\pi} \cdot \frac{e^{i\bar{\omega}(t-t')}}{\bar{\omega} - i\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot e^{-i\omega'(t-t')} \cdot \chi''(\omega')\end{aligned}$$

Această expresie se aduce imediat la forma:

$$\delta \langle \phi(\omega) \rangle = \delta h(\omega) \cdot \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\omega}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot \chi''(\omega') \cdot \frac{1}{\bar{\omega} - i\epsilon}.$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \cdot e^{i(\omega+\bar{\omega}-\omega')(t-t')}$$

sau:

$$\delta \langle \phi(\omega) \rangle = \delta h(\omega) \cdot \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\omega}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \cdot \frac{\chi''(\omega')}{\bar{\omega} - i\epsilon} \cdot \delta[\bar{\omega} - (\omega' - \omega)]$$

de unde:

$$\delta \langle \phi(\omega) \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - (\omega + i\epsilon)} \cdot \delta h(\omega), \quad z = \omega + i\epsilon$$

și în final:

$$\delta \langle \phi(\omega) \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi(\omega + i\epsilon) \cdot \delta h(\omega) = \chi(\omega) \cdot \delta h(\omega)$$

Astfel, funcția de răspuns $\chi(\omega)$ este limita când z se apropie de axa reală pentru $\chi(z)$, care este analitică în semiplanul superior ($\chi(\omega)$ este prelungirea analitică la axa reală a lui $\chi(z)$). Când frecvența perturbației exterioare tinde la zero, $\chi(\omega)$ trebuie să se reducă la susceptibilitatea statică:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\omega')}{\omega'} = \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial h} = \chi \quad (1.22)$$

Aceasta este o **regulă de sumă** legînd o integrală peste $\chi''(\omega)$ cu o mărime statică, susceptibilitatea statică. Deoarece cantitatea statică este o derivată termodinamică, relația de mai sus este adesea numită regula de sumă **termodinamică**.

Funcția de răspuns $\chi(\omega)$, spre deosebire de limita statică, are o parte reală și o parte imaginară, după cum se poate vedea folosind identitatea:

$$\frac{1}{\omega' - \omega - i\epsilon} = P \frac{1}{\omega' - \omega} + i\pi \delta(\omega - \omega') \quad (1.23)$$

(P înseamnă partea principală) în ecuațiile (1.17) și (1.20). Rezultatul este:

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega) \quad (1.24)$$

unde:

$$\chi'(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (1.25)$$

Deoarece $\chi''(\omega)$ este o funcție reală, și $\chi'(\omega)$ este tot reală. Astfel, $\chi'(\omega)$ și $\chi''(\omega)$ sînt partea reală și cea imaginară a funcției de răspuns completă

$\chi(\omega)$. Ecuația (1.25) este relația **Kramers-Kronig** între partea reală și cea imaginară a lui $\chi(\omega)$. Există deasemenea expresii complementare care leagă $\chi''(\omega)$ de $-\chi'(\omega)$. Acestea sînt ușor de obținut folosind reprezentarea Cauchy pentru $\chi(z)$:

$$\chi(z) = \oint_{\Gamma} \frac{d\zeta}{2\pi i} \cdot \frac{\chi(\zeta)}{\zeta - z} \quad (1.26)$$

unde conturul Γ este semicercul prezentat în Fig.1.1

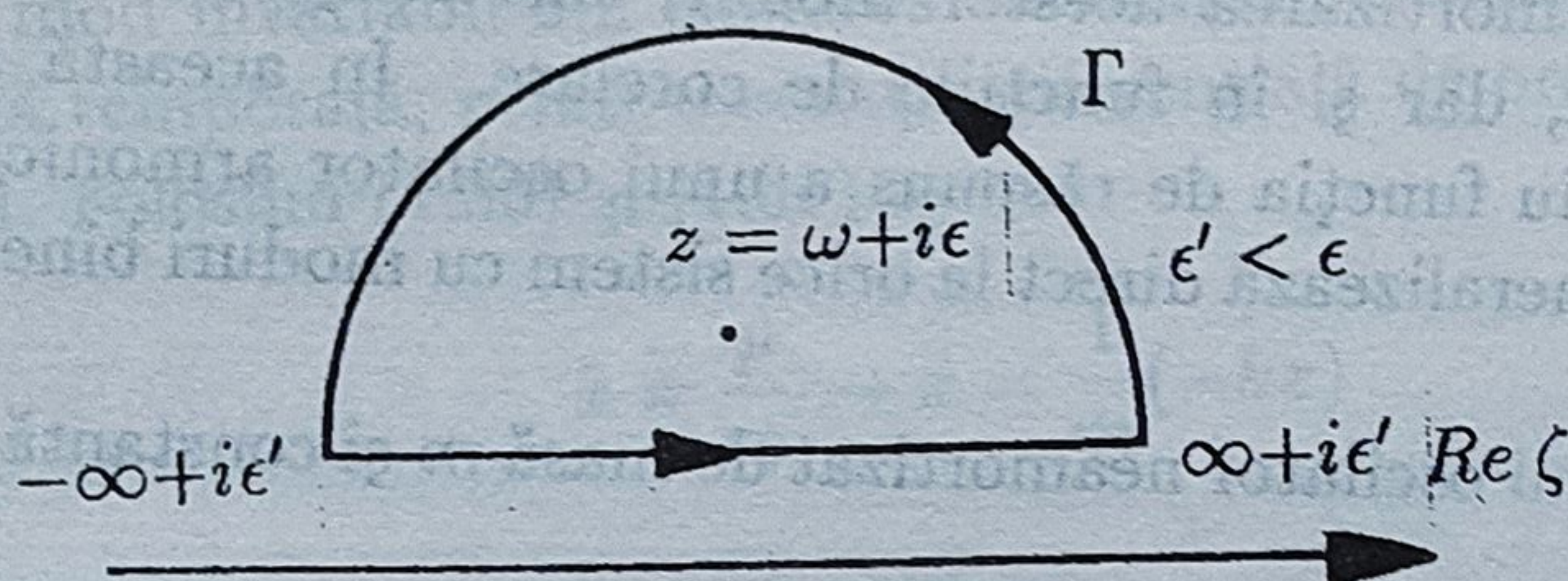


Fig.1.1 Conturul în planul complex pentru integrala din (1.26)

În majoritatea cazurilor de interes, $\chi(z)$ tinde spre zero mai repede decît $1/z$ cînd $z \rightarrow \infty$. În acest caz, integrala din ec.(1.26) se reduce la integrala de-a lungul liniei aflate chiar deasupra axei reale, adică de la $-\infty + i\epsilon'$ la $\infty + i\epsilon'$. Astfel, punînd $z = \omega + i\epsilon$, cu $\epsilon' < \epsilon$, obținem:

$$\chi(\omega + i\epsilon) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \cdot \frac{\chi(\omega' + i\epsilon')}{\omega' - \omega} + \frac{1}{2}\chi(\omega + i\epsilon') \quad (1.27)$$

Folosind ec.(1.24) și (1.25) obținem:

$$\chi''(\omega) = -P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \cdot \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (1.28)$$

Ecuațiile (1.25) și (1.28) sînt relațiile Kramers-Kronig uzuale. Ele necesită mici modificări dacă $\chi(z)$ nu descrește mai repede decît $1/z$ la infinit. Adesea este mai ușor să măsurăm $\chi''(\omega)$ (de exemplu printr-un experiment de absorbție) decît $\chi'(\omega)$. Dacă măsurătorile pentru $\chi''(\omega)$ sînt făcute pe un interval de frecvențe suficient de mare, partea reală a răspunsului poate fi obținută folosind ec.(1.25).

Oscilatorul armonic

Oscilatorul neamortizat

Proprietățile dinamice ale sistemelor condensate sînt adesea descrise de moduri de tip oscilator armonic. Aceste moduri includ undele sonore în fluide, unde elastice și fononi în solide și unde de spin în magneti. Informațiile despre frecvența și amortizarea acestor moduri sînt conținute în funcțiile de răspuns dinamice, dar și în funcțiile de corelare. În această secțiune vom analiza în detaliu funcția de răspuns a unui oscilator armonic simplu. Proprietățile ei se generalizează direct la orice sistem cu moduri bine definite la frecvențe finite.

Hamiltonianul unui oscilator neamortizat de masă m și constantă elastică k este:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (1.29)$$

Ecuatiile de mișcare pentru poziție $x(t)$ și impuls $p(t)$ sînt:

$$\dot{x} \equiv v = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad (1.30)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx \quad (1.31)$$

Structura modurilor implicate de către aceste ecuații se obține considerînd că atît $x(t)$ cît și $p(t)$ sînt proporționale cu $e^{-i\omega t}$ și rezolvînd ecuația caracteristică rezultantă:

$$-\omega^2 + k/m = 0$$

Această ecuație are două soluții:

$$\omega_{1,2} = \pm\omega_0 = \pm\sqrt{k/m} \quad (1.32)$$

Fiecare din aceste soluții corespund unui **mod** al oscilatorului armonic. De notat că avem un mod per grad de libertate (x și p). Dependența de timp pentru fiecare grad de libertate este guvernată de o ecuație diferențială de **ordinul unu** în raport cu timpul. Astfel, avem un mod per ecuație diferențială de ordinul întâi. Această proprietate este generală și este considerată adesea în studiile de hidrodinamică.

Variabilele $x(t)$ și $p(t)$ au semne contrare în urma unei operații de inversie temporală: $x(-t) = +x(t)$, în timp ce $p(-t) = -p(t)$. Hamiltonianul (1.29) și ecuațiile de mișcare asociate lui, (1.30) și (1.31), sînt invariante în raport cu inversia temporală. Ecuațiile de mișcare leagă derivata în raport cu timpul a unei variabile cu un semn în raport cu inversia temporală, cu variabila de semn opus. Aceste relații conduc la termeni nediagonali în determinantul caracteristic și la soluții **nenule** și **reale** ale ecuației caracteristice. Această proprietate este, din nou, una generală: modurile de frecvență reală, nenulă, provin în mod invariabil din cuplarea variabilelor de semne opuse în raport cu inversia temporală, printr-o ecuație diferențială de ordinul întâi în raport cu timpul. Folosind (1.30) și (1.31) avem:

$$\ddot{x} = \frac{\dot{p}}{m} \rightarrow \ddot{x} = \frac{1}{m}(-kx)$$

sau:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 \cdot x = 0 \quad (1.33)$$

Această ecuație, ca și ec.(1.30) și (1.31) este invariantă în raport cu inversia temporală și duce la moduri avînd frecvențele $\pm\omega_0$.

Oscilatorul amortizat

Pentru a introduce amortizarea într-un mod intuitiv, vom plasa particula de masă m într-un fluid vîscos. În limita vitezelor mici, forța de frecare (vîscoasă) proporțională cu viteza, poate fi scrisă ca:

$$f_{vis} = -\alpha v \quad (1.34)$$

unde α este o constantă de frecare avînd unitatea de măsură [masă]/[timp]. În mod alternativ, $v = -(1/\alpha) \cdot f_{vis}$, unde α^{-1} se numește mobilitate. Pentru o sferă de rază a , mișcîndu-se într-un fluid de vîscozitate η , α este dat de legea lui Stokes:

$$\alpha = 6\pi\eta a \quad (1.35)$$

Vîscozitatea η are unitatea de măsură [energie×timp]/[volum] (poise) și este de ordinul $n_{fl}\tau_c T$ într-un fluid avînd densitatea de particule n_{fl} , la temperatura T și în care timpul mediu între ciocnirile moleculare succesive este τ_c .

Atît α cît și η vor fi considerați drept parametrii fenomenologici. În prezența forței de frecare și a unei forțe exterioare f , ecuația de mișcare pentru oscilatorul armonic unidimensional devine:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \gamma \cdot \dot{x} = \frac{f}{m} \quad (1.36)$$

unde:

$$\gamma = \frac{\alpha}{m} \quad (1.37)$$

Timpul caracteristic de atenuare $\gamma^{-1} = m/(6\pi\eta a)$ este de ordinul $m/(an_{fl}\tau_c T)$. Dacă distanța medie dintre particule este $d = n_{fl}^{-1/3}$ și parcurusul liber mediu $v\tau_c = (2T/m_{fl})^{1/2}\tau_c$, unde m_{fl} este masa unei particule de fluid, și ele sînt de același ordin de mărime, atunci $\gamma^{-1} \sim (m/m_{fl})(d/a)\tau_c$. Pentru majoritatea particulelor microscopice $m_{fl} \ll m$ și $\gamma^{-1} \gg \tau_c$. Forța de frecare distruge invarianța temporală în ec.(1.36). Orice hamiltonian microscopic și ecuațiile de mișcare asociate lui trebuie să fie invariante în raport cu inversia temporală. În acest caz, hamiltonianul microscopic este acela care descrie oscilatorul armonic împreună cu toate gradele de libertate ale fluidului în care acesta se mișcă. Forța vîscoasă descrie efectul mediu asupra oscilatorului armonic datorat interacțiilor cu multitudinea gradelor de libertate incoerente ale fluidului. În general, orice energie a oscilatorului armonic va tinde să se scurgă în mod ireversibil înspre multitudinea de moduri ale fluidului. Acest lucru este reflectat în semnul forței vîscoase, care conduce la scăderea lui $x(t)$ cu timpul. Scurgerea ireversibilă a energiei înspre gradele de libertate incoerente se numește **disipație**, iar f_{vis} este atunci o forță disipativă. Structura modurilor pentru oscilatorul armonic amortizat este determinată de ecuația:

$$-\omega^2 + \omega_0^2 - i\gamma\omega = 0 \quad (1.38)$$

cu soluțiile:

$$\omega = \pm[\omega_0^2 - (\gamma^2/4)]^{1/2} - i\gamma/2 \equiv \pm\omega_1 - i\gamma/2 \quad (1.39)$$

Dacă $\omega_0^2 > \gamma^2/4$, ω_1 este real, iar soluțiile pentru $x(t)$ vor oscila cu frecvența ω_1 și vor fi atenuate în timp, cu constanta de timp $\tau = 2/\gamma$. Dacă $\omega_0^2 < \gamma^2/4$, ω_1 este imaginar, nemaexistînd o componentă oscilatorie a lui $x(t)$. În acest caz, se spune că oscilatorul este **superamortizat**, cu inversele timpilor de atenuare:

$$\tau_f^{-1} = \frac{\gamma}{2} \cdot [1 + (1 - 4\omega_0^2\gamma^{-2})^{1/2}] \xrightarrow{\omega_0 \ll \gamma/2} \gamma$$

$$\tau_s^{-1} = \frac{\gamma}{2} \cdot [1 - (1 - 4\omega_0^2\gamma^{-2})^{1/2}] \xrightarrow{\omega_0 \ll \gamma/2} \frac{\omega_0^2}{\gamma} = \frac{k}{\alpha} \quad (1.40)$$

Cînd $\omega_0^2 \ll \gamma^2/4$, timpul de atenuare rapid τ_f este mult mai scurt decît timpul de atenuare lent τ_s . Astfel, pentru intervale de timp mari în comparație cu τ_f , primul mod poate fi neglijat. Aceasta corespunde, în ecuațiile de mișcare originale, neglijării termenului **inercial** $m\ddot{x}$. Ecuația care rezultă este:

$$\alpha\dot{x} = -kx + f \quad (1.41)$$

Această ecuație de mișcare aproximativă se scrie adesea sub forma:

$$\dot{x} = -\frac{k}{\alpha} \cdot x + \frac{1}{\alpha} \cdot f = -\Gamma \cdot \frac{\partial H_T}{\partial x} \quad (1.42)$$

unde $\Gamma = \alpha^{-1}$ și $H_T = H - fx$ este hamiltonianul total incluzînd $H_{ext} = -fx$. Ea este foarte folositoare în studiul dinamicii sistemelor, cum ar fi polimerii în soluții, descrise de efecte de tip vîscos.

Funcția de răspuns

Răspunsul dependent de frecvență a lui x , la o forță exterioară, se calculează ușor folosind ecuațiile (1.20) și (1.36):

$$\chi(\omega) = \frac{x(\omega)}{f(\omega)} = \frac{1}{m} \cdot \frac{1}{-\omega^2 + \omega_0^2 - i\omega\gamma} \quad (1.43)$$

Numitorul acestei ecuații este chiar ecuația caracteristică (1.38) care determină structura modurilor. Astfel, $\chi(\omega)$ **are poli la frecvențe complexe corespunzătoare modurilor oscilatorului**. Acest rezultat are caracter general.

O forță exterioară statică f va conduce la o deplasare de echilibru $x = f/k$. Acest rezultat este descris corect de ec.(1.43) în limita frecvenței tinzînd la zero:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi(\omega) = \frac{1}{m\omega_0^2} = \frac{1}{k} = \frac{\partial x}{\partial f} = \chi \quad (1.44)$$

La frecvențe înalte, $\chi(\omega)$ este negativ și scade ca ω^{-2} , cu un coeficient care depinde numai de masă:

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \chi(\omega) = -\frac{1}{m\omega^2} \quad (1.45)$$

Partea imaginară a funcției de răspuns este:

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{m} \cdot \frac{\omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\gamma)^2} \quad (1.46)$$

$$= \frac{1}{2m\omega_1} \left[\frac{\gamma/2}{(\omega - \omega_1)^2 + (\gamma/2)^2} - \frac{\gamma/2}{(\omega + \omega_1)^2 + (\gamma/2)^2} \right]$$

În limita $\gamma \rightarrow 0$, $\omega_1 \rightarrow \omega_0$ și folosind formula:

$$\pi \cdot \delta(x - x_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{(x - x_0)^2 + \epsilon^2} \quad (1.47)$$

avem:

$$\chi''(\omega) = \frac{\pi}{2m\omega_0} [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)] \quad (1.48)$$

Din (1.46) și (1.48) vedem că $\chi''(\omega)$ este **real** și **impar** în ω și are picuri de tip linie Lorentziană centrate la $\omega = \pm\omega_1$ (când ω_1 este real) cu semilărgimea la jumătate din maximum egală cu $\gamma/2$. Mai mult, când amortizarea vîscoasă este zero, $\chi''(\omega)$ conține funcții de tip delta la frecvențele $\pm\omega_0$ corespunzătoare oscilatorului neamortizat.

Partea reală a funcției de răspuns este:

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{m} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \quad (1.49)$$

$\chi'(\omega)$ este pozitiv pentru $\omega < \omega_0$, tinzînd la $1/k$ când $\omega \rightarrow 0$; este negativ pentru $\omega > \omega_0$, tinzînd la $-1/(m\omega^2)$ când $\omega \rightarrow \infty$ și este zero pentru $\omega = \omega_0$.

$\chi''(\omega)$ și $\chi'(\omega)$ sînt reprezentate în Fig.1.2

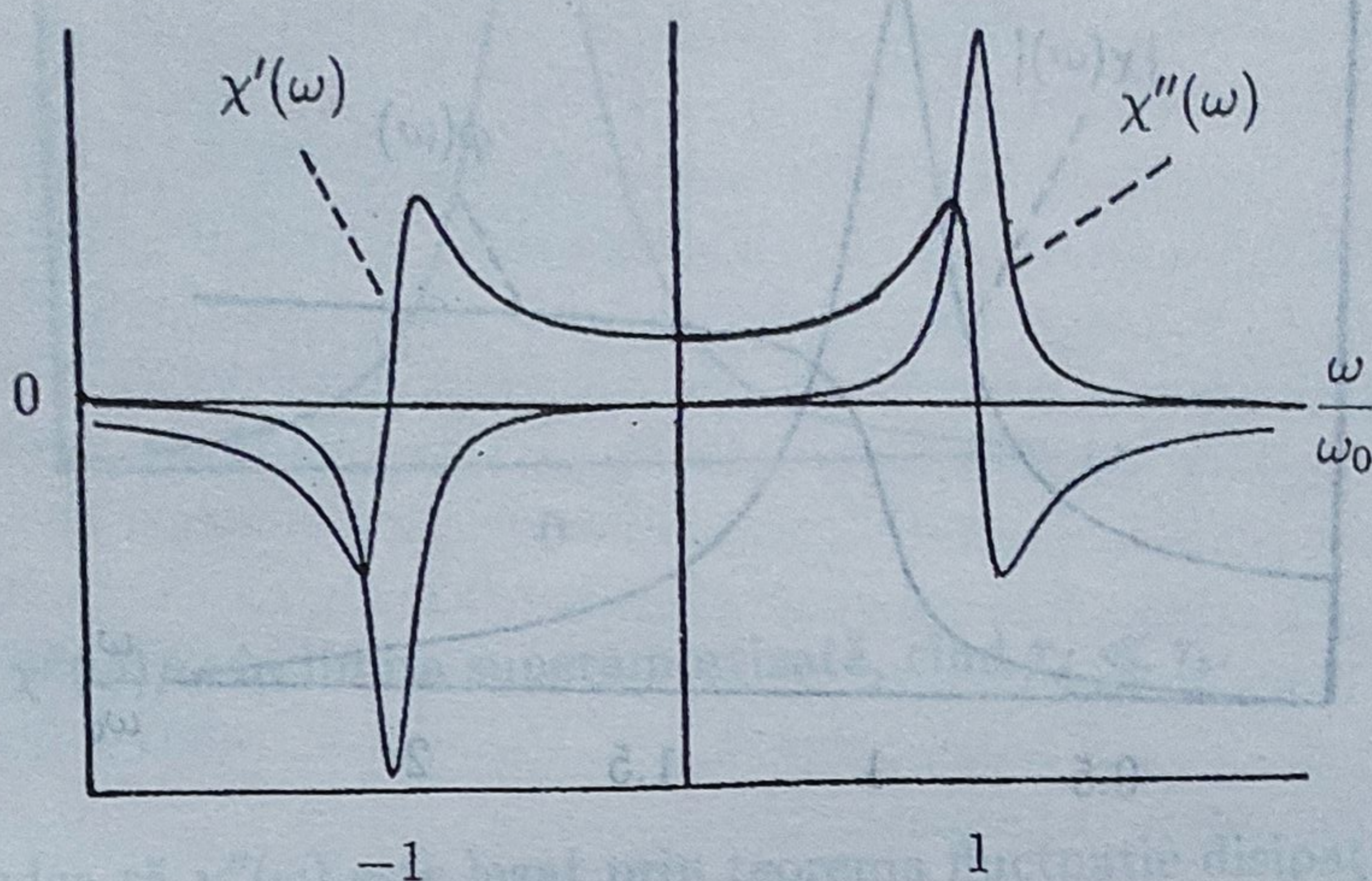


Fig.1.2 $\chi''(\omega)$ și $\chi'(\omega)$ pentru oscilatorul armonic, când ω_1 este real.

Dependența de timp stabilă, pentru $x(t)$ în prezența unei forțe $f(t) = f_0 \cdot \cos \omega t$ se obține din partea reală a lui $\chi(\omega) f_0 e^{-i\omega t} = |\chi(\omega)| \cdot f_0 e^{-i(\omega t - \phi)}$:

$$x(t) = f_0 \cdot |\chi(\omega)| \cdot \cos[\omega t - \phi(\omega)] \quad (1.50)$$

unde:

$$|\chi(\omega)| = \frac{1}{m} \cdot \frac{1}{[(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2 \gamma^2]^{1/2}} \quad (1.51)$$

și:

$$\tan \phi(\omega) = \frac{\chi''(\omega)}{\chi'(\omega)} = \frac{\omega \gamma}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (1.52)$$

Astfel, amplitudinea lui $x(t)$ atinge maximum pentru frecvențe situate în vecinătatea frecvenței naturale ω_0 a oscilatorului. Mai mult, modificarea de fază, descriind gradul în care $x(t)$ rămîne în urma lui $f(t)$, trece prin $\pi/2$ exact la ω_0 . $|\chi(\omega)|$ și $\phi(\omega)$ sînt reprezentate în Fig.1.3

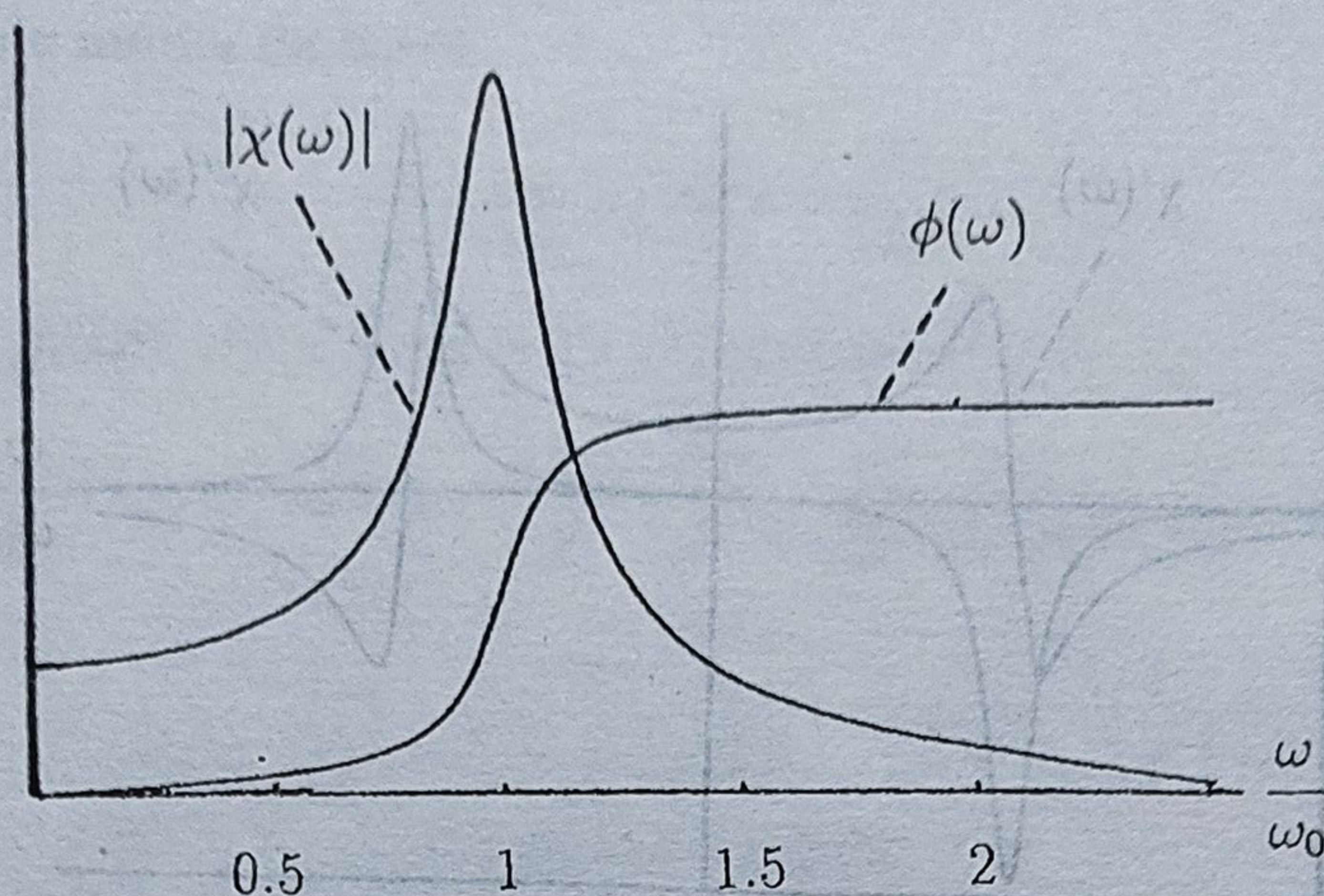


Fig.1.3 Funcțiile amplitudine și fază $|\chi(\omega)|$ și $\phi(\omega)$ pentru un oscilator armonic.

În cazul extrem superamortizat, la frecvențe $\omega\tau_f \ll 1$, când termenii inerțiali pot fi ignorați:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{m} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - i\omega\gamma} = \chi \cdot \frac{1}{1 - i\omega\tau_s} \quad (1.53)$$

și:

$$\frac{\chi''(\omega)}{\omega} = \chi \cdot \frac{\tau_s^{-1}}{\omega^2 + \tau_s^{-2}} \quad (1.54)$$

Astfel, $\chi''(\omega)/\omega$ este o Lorentziană centrată în origine, după cum se vede din Fig.1.4. Integrala ei peste ω satisface regula de sumă termodinamică (1.22). Comportarea la frecvențe înalte a lui $\chi(z)$ este determinată de momentele lui $\chi''(\omega)$, după cum se poate vedea dacă dezvoltăm reprezentarea (1.17) după puterile lui $1/z$:

$$\begin{aligned} \chi(z) &= -\frac{1}{z} \int \frac{d\omega}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\omega)}{1 - \frac{\omega}{z}} \\ &= -\frac{1}{z} \int \frac{d\omega}{\pi} \cdot \omega \cdot \frac{\chi''(\omega)}{\omega} - \frac{1}{z^2} \int \frac{d\omega}{\pi} \cdot \omega^2 \cdot \frac{\chi''(\omega)}{\omega} + \dots \end{aligned} \quad (1.55)$$

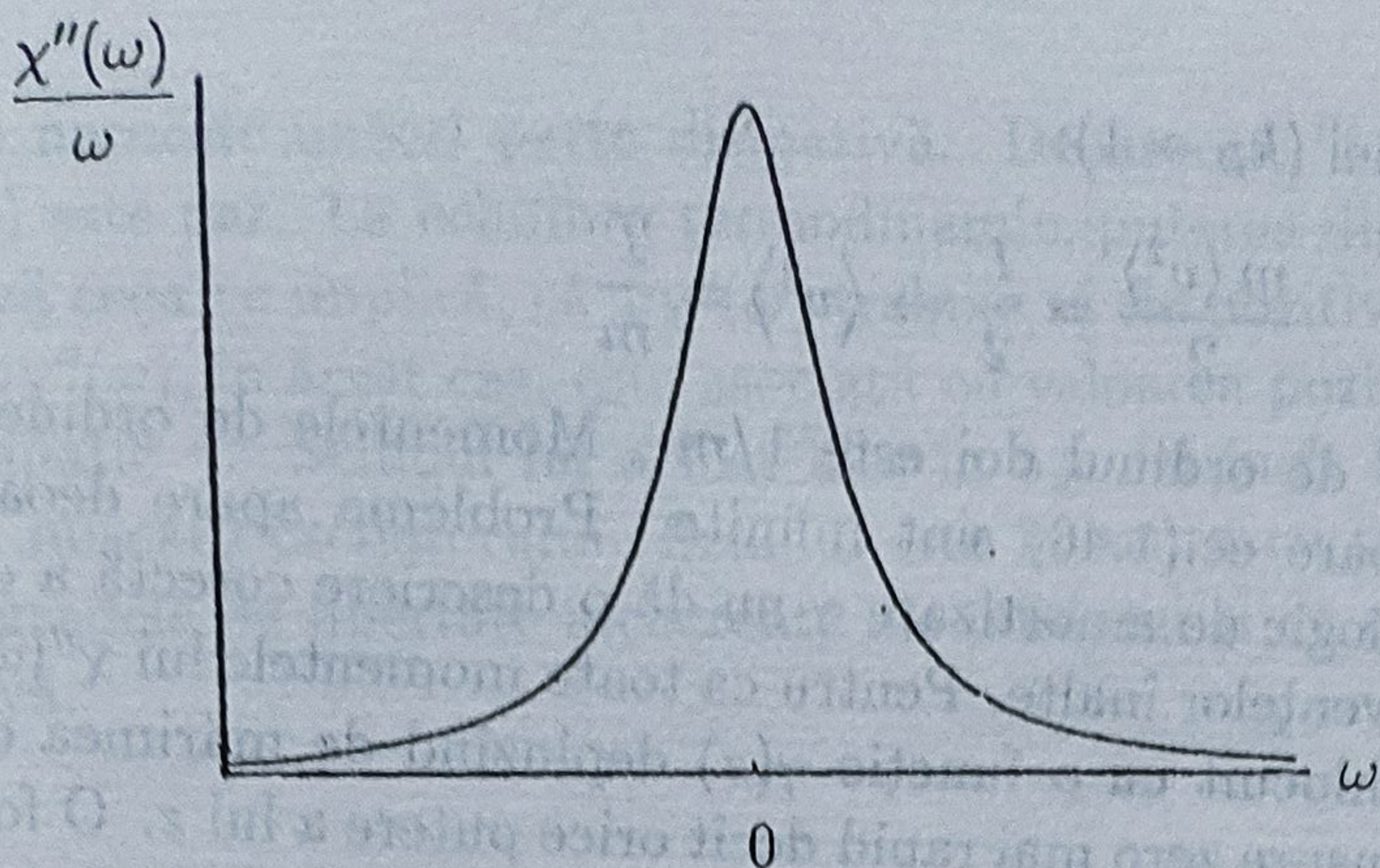


Fig.1.4 $\chi''(\omega)/\omega$ în limita superamortizată, când $\tau_f \ll \tau_s$.

Vom vedea că $\chi''(\omega)$ este legat prin teorema fluctuație-disipație de $S(\omega)$ măsurînd fluctuațiile lui x , via:

$$\frac{\chi''(\omega)}{\omega} = \frac{S(\omega)}{2T}$$

Momentele lui $S(\omega)$ sînt funcțiile de corelație pentru $x(t)$ luate la același moment de timp, precum și derivatele lor în raport cu timpul:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \omega^n S(\omega) = i^n \left\langle \left(\frac{d}{dt} \right)^n x(t)x(t') \right\rangle_{t'=t} = T \int \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \omega^n \frac{\chi''(\omega)}{\omega} \quad (1.56)$$

Momentele corespunzătoare lui n impar sînt toate zero deoarece $\chi''(\omega)$ este impară în ω . Primele două momente nenule ale formei fenomenologice (1.46) pentru $\chi''(\omega)$ sînt finite. Momentul de ordinul zero este χ , în acord cu cerințele regulii de sumă termodinamice. Cel de-al doilea moment este:

$$-\frac{\langle \ddot{x}(t)x(t) \rangle}{T}$$

sau, scriînd:

$$-(\ddot{x} \cdot x) = (\dot{x})^2 - \frac{d}{dt}(\dot{x} \cdot x)$$

avem:

$$-\frac{1}{T} \langle \ddot{x}(t)x(t) \rangle = \frac{1}{T} \langle (\dot{x}(t))^2 \rangle - \frac{1}{T} \cdot \frac{d}{dt} \left[\frac{T}{i} \int \frac{d\omega}{\pi} \cdot \chi''(\omega) \right] = \frac{1}{T} \langle (\dot{x}(t))^2 \rangle = \frac{\langle v^2 \rangle}{T}$$

Din echipartiția energiei ($k_B = 1$):

$$\frac{m \langle v^2 \rangle}{2} = \frac{T}{2} \rightarrow \langle v^2 \rangle = \frac{T}{m}$$

astfel încît momentul de ordinul doi este $1/m$. Momentele de ordine superioare corespunzătoare ec.(1.46) sînt infinite. Problema apare deoarece parametrul fenomenologic de amortizare γ nu dă o descriere corectă a comportării în limita frecvențelor înalte. Pentru ca toate momentele lui $\chi''(\omega)/\omega$ să existe, γ trebuie înlocuit cu o funcție $\gamma(z)$ depinzînd de mărimea complexă z și care tinde înspre zero mai rapid decît orice putere a lui z . O formă fenomenologică adesea folosită pentru γ este $\gamma(z) = \gamma/(1 - iz\tau)$, unde τ este un timp de ciocnire microscopic. Aastă formă conduce la o valoare finită a momentului de ordinul patru, pentru $\chi''(\omega)/\omega$, dar la valori infinite pentru momentele de ordine superioare.

Disipația

În starea stabilă, forța externă lucrează asupra oscilatorului, disipînd căldură în fluidul vîscos. Rata de disipare, corespunzătoare forței externe, este:

$$\frac{dW}{dt} = f(t) \cdot \dot{x}(t) \quad (1.57)$$

Deoarece în starea stabilă atît $f(t)$ cît și $\dot{x}(t)$ sînt funcții periodice de t , cu perioada $T = 2\pi/\omega$, puterea medie disipată este :

$$P = \frac{1}{T} \int_0^T dt \cdot f(t) \cdot \dot{x}(t) = -\frac{1}{T} \int_0^T dt \cdot x(t) \cdot \dot{f}(t) \quad (1.58)$$

Folosind ec.(1.50) pentru $x(t)$, obținem:

$$\begin{aligned} P &= -\frac{f_0^2}{T} \int_0^T dt \cdot \omega \cdot |\chi(\omega)| \cdot \cos \omega t \cdot \sin[\omega t - \phi(\omega)] \\ &= \frac{1}{2} \omega f_0^2 |\chi(\omega)| \cdot \sin \phi(\omega) = \frac{1}{2} f_0^2 \omega \chi''(\omega) \end{aligned} \quad (1.59)$$

Astfel am ajuns la un rezultat foarte important care ne spune că rata de disipare a energiei este proporțională cu $\omega \chi''(\omega)$. Din acest motiv, $\chi''(\omega)$

se mai numește uneori parte disipativă. Deoarece $\chi''(\omega)$ este impar în ω , $\omega\chi''(\omega)$ este par. La echilibru termodinamic, puterea disipată trebuie să fie pozitivă ceea ce implică, că $\omega\chi''(\omega)$ trebuie să fie pozitiv. Valoarea pozitivă a lui $\omega\chi''(\omega)$, în acest caz, este asociată cu valoarea pozitivă a coeficientului de disipație γ . Semnul lui a fost ales în așa fel încît forța vîscoasă să se opună mișcării oscilatorului. Semnul este în acord cu transferul de energie către gradele de libertate incoerente ale fluidului și cu absorbția de energie pozitivă.

Difuzia

Legea lui Fick

Considerăm particule dizolvate sau în suspensie într-un fluid. Pentru moment natura acestor particule este arbitrară. Ele pot fi molecule dintr-o specie diferită de cea a moleculelor care formează fluidul sau pot fi fire de praf sau sfere din polistiren cu diametre de ordinul 0,1 microni. Numărul acestor particule nu se modifică pe măsura trecerii timpului. Astfel, densitatea lor $n(\vec{x}, t)$ (dată prin pozițiile particulelor, ec.(1.3)) verifică legea de conservare:

$$\frac{\partial n(\vec{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.60)$$

unde:

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha} \vec{v}_{\alpha}(t) \cdot \delta(\vec{x} - \vec{x}_{\alpha}(t)) \quad (1.61)$$

este curentul de particule, iar $\vec{v}_{\alpha}(t) = \dot{\vec{x}}_{\alpha}(t)$ este viteza particulei. La echilibru termic, particulele sînt uniform distribuite în fluid, și media termică $\langle n(\vec{x}, t) \rangle$ a densității este independentă de \vec{x} și t . Ne întrebăm ce se întîmplă atunci cînd, ca rezultat al unor fluctuații spontane sau a unei forțe exterioare, apare la un anumit moment dat o neuniformitate spațială a densității, cum este cea reprezentată în Fig. 1.5 ?

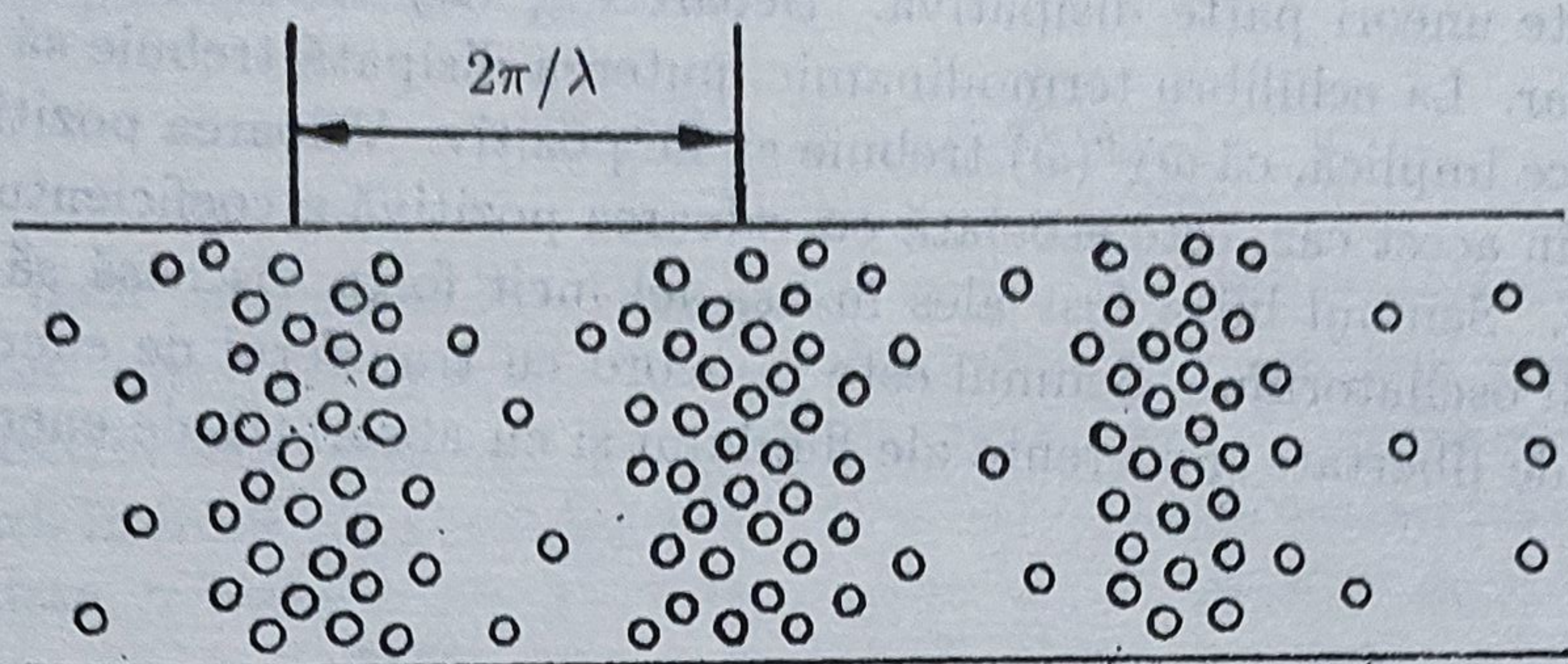


Fig.1.5 Distribuția de particule modulată spațial.

Dacă forțele externe sînt înlăturate, densitatea trebuie să tindă spre starea de echilibru, cu distribuție spațială uniformă. Acest lucru se întîmplă numai dacă particulele se deplasează. Astfel ne așteptăm ca o neuniformitate spațială a densității să dea naștere unui curent de particule \vec{j} . Dacă densitatea variază foarte puțin în spațiu, atunci ea este aproape de echilibru în fiecare punct din spațiu, iar curenții trebuie să fie foarte mici. Aceste considerații ne conduc spre observația că, curentul trebuie să fie proporțional cu gradientul densității. Cea mai simplă relație între \vec{j} și ∇n este:

$$\vec{j} = -D \cdot \nabla n \quad (1.62)$$

Aastă ecuație este cunoscută ca **legea lui Fick**. Ea este o relație fenomenologică analoagă cu ecuația care leagă forța vîscoasă de viteză. Ea ne spune că o neuniformitate spațială a densității duce la apariția de curenți în direcții opuse direcției de modificare a densității, curenți care au tendința de a restabili uniformitatea spațială a lui $n(\vec{x}, t)$. Coeficientul D se numește **constanta de difuzie**, și are unitatea de măsură $[lungime]^2/[timp]$. Curentul \vec{j} este impar la inversia temporală, în timp ce $n(\vec{x}, t)$ și gradientul său sînt pari. Astfel, cele două părți ale ec.(1.62) au semne opuse la inversia temporală, iar constanta de difuzie joacă rolul unui coeficient de disipație. Cînd legea lui Fick este substituită în legea de conservare rezultă ecuația difuziei:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 n \quad (1.63)$$

Modurile date de această ecuație se obțin din nou considerînd

$$n(\vec{x}, t) \sim e^{i\vec{q}\vec{x}} \cdot e^{-i\omega t}$$

Rezultă că frecvența modului este:

$$\omega = -iDq^2 \quad (1.64)$$

unde $q = 2\pi/\lambda$ este numărul de undă corespunzător modulației spațiale a densității. Frecvența obținută este pur imaginară, implicînd, ca și în cazul oscilatorului superamortizat, că răspunsul lui $n(\vec{x}, t)$ la forțe exterioare va descrește exponențial înspre zero într-un interval de timp de ordinul $D^{-1}\lambda^2$. Nu va exista parte oscilatorie corespunzătoare acestei atenuări.

Funcția Green și răspunsul dinamic

Densitatea la poziția \vec{x} și momentul t este legată de densitatea la poziția \vec{x}' și momentul t' prin:

$$n(\vec{x}, t) = \int d^d x' \cdot G(\vec{x} - \vec{x}', t - t') \cdot n(\vec{x}', t') \quad (1.65)$$

unde $G(\vec{x}, t)$ este funcția Green difuzivă. Ea satisface condiția inițială:

$$G(\vec{x} - \vec{x}', t = 0) = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (1.66)$$

Pentru momente de timp $t > 0$, $G(\vec{x}, t)$ satisface aceeași ecuație ca și $n(\vec{x}, t)$:

$$\frac{\partial G(\vec{x}, t)}{\partial t} - D \cdot \nabla^2 G(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.67)$$

Soluția acestei ecuații cu condiția inițială (1.66) poate fi obținută făcînd o transformată Laplace în timp și o transformată Fourier în spațiu. Soluția va fi:

$$G(\vec{q}, z) = \frac{1}{-iz + Dq^2} \quad (1.68)$$

Acest rezultat se obține scriînd:

$$0 = \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \int_0^\infty dt \cdot e^{izt} \left[\frac{\partial}{\partial t} G(\vec{x}, t) - D \cdot \nabla^2 G(\vec{x}, t) \right]$$

sau:

$$0 = \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \left[\int_0^\infty dt \cdot e^{izt} \frac{\partial}{\partial t} G(\vec{x}, t) - D \int_0^\infty dt \cdot e^{izt} \cdot \nabla^2 G(\vec{x}, t) \right]$$

Integrând prin părți primul termen din paranteza dreaptă, vom obține:

$$0 = - \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} G(\vec{x}, t=0) - \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \int_0^\infty dt \cdot iz e^{izt} G(\vec{x}, t) - \\ - D \int_0^\infty dt \cdot e^{izt} \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} G(\vec{x}, t) \right)$$

Efectuând două integrări prin părți (după variabila coordonată) în ultimul termen din expresia de mai sus, obținem (după regruparea termenilor):

$$0 = (-iz + Dq^2) \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \int_0^\infty dt \cdot e^{izt} G(\vec{x}, t) - 1$$

Prin definiție însă:

$$G(\vec{q}, z) = \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \int_0^\infty dt \cdot e^{izt} G(\vec{x}, t)$$

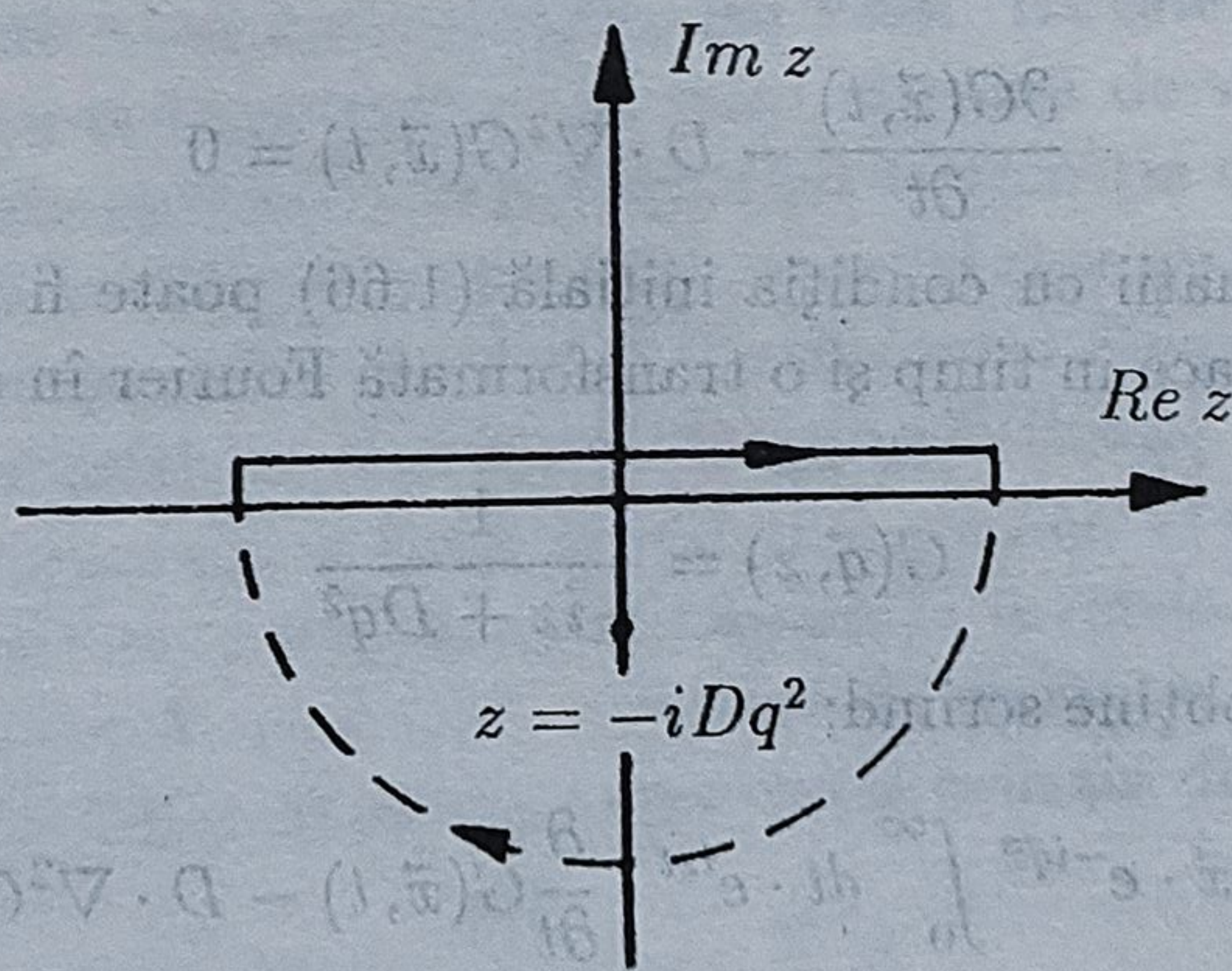
deci:

$$G(\vec{q}, z) = \frac{1}{-iz + Dq^2}$$

$G(\vec{q}, z)$ are un pol la $z = -iDq^2$. Acest pol se numește **pol difuziv**. Folosind (1.68) obținem $G(\vec{q}, t)$:

$$G(\vec{q}, t) = \int_{-\infty+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} \frac{dz}{2\pi} e^{-izt} G(\vec{q}, z) = \int_{-\infty+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} \frac{dz}{2\pi} \cdot \frac{e^{-izt}}{-iz + Dq^2}$$

Pentru $t > 0$ ($t \rightarrow |t|$) vom închide conturul de integrare prin semiplanul inferior



și vom obține:

$$G(\vec{q}, t) = -2\pi i \cdot \text{Rez} \left(f(z); -iDq^2 \right) = e^{-Dq^2|t|} \quad (1.69)$$

Vom determina apoi $G(\vec{x}, t)$:

$$G(\vec{x}, t) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \cdot e^{i\vec{q}\vec{x}} G(\vec{q}, t)$$

Considerăm cazul tridimensional, când:

$$d = 3 \quad d^3 q = q^2 \sin \theta \cdot dq d\theta d\varphi \quad |\vec{q}| = q \quad |\vec{x}| = x$$

Integrala după variabila φ este imediată și avem:

$$G(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dq \cdot q^2 e^{-Dq^2|t|} \int_0^\pi d\theta \cdot \sin \theta \cdot e^{iqx \cos \theta}$$

Integrala după variabila θ se rezolvă cu ajutorul schimbării de variabilă:

$$iqx \cdot \cos \theta = u$$

avînd:

$$G(\vec{x}, t) = \frac{2}{(2\pi)^2 x} \int_0^\infty dq \cdot q \cdot \sin(qx) \cdot e^{-Dq^2|t|}$$

Folosind integrala:

$$\int_0^\infty dy \cdot y \cdot \sin(\beta y) \cdot e^{-p^2 y^2} = \frac{\beta \sqrt{\pi}}{4p^3} \cdot e^{-\beta^2/4p^2}$$

vom găsi în final că:

$$G(\vec{x}, t) = \frac{1}{(4\pi D|t|)^{3/2}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4D|t|}}$$

iar în d dimensiuni:

$$G(\vec{x}, t) = \frac{1}{(4\pi D|t|)^{d/2}} \cdot e^{-\frac{|\vec{x}|^2}{4D|t|}} \quad (1.70)$$

Această relație ne spune că densitatea de particule, inițial localizată în origine, se va răspîndi pe măsură ce timpul trece, ocupînd o regiune pentru care media pătratului razei regiunii este:

$$\langle |\vec{x}|^2 \rangle = 2 \cdot d \cdot D|t| \quad (1.71)$$

unde d este dimensionalitatea spațiului. Atunci, constanta de difuzie se observă că măsoară media pătratului deplasării în intervalul de timp unitar.

Funcția de răspuns

Funcția Green ne permite să determinăm densitatea la momentul t dacă cunoaștem densitatea la un moment anterior t' . Ea nu ne dă însă direct funcția de răspuns densitate. Pentru a obține funcția de răspuns vom crea o neuniformitate în spațiu a densității, la momentul $t < 0$, care este în echilibru cu un potential chimic exterior, care are o mică variație spațială $\delta\mu(\vec{x})$. Apoi suprimăm potențialul chimic exterior, la momentul $t = 0$. Pentru $t > 0$, starea de echilibru corespunde din nou unei uniformități spațiale, iar trecerea spre această stare de echilibru este controlată de funcția Green. Hamiltonianul extern care crează variația spațială a densității este :

$$H_{ext} = - \int d^d x \cdot n(\vec{x}, t) \cdot \delta\mu(\vec{x}) \cdot \eta(-t) \cdot e^{\epsilon t} \quad (1.72)$$

unde ϵ este o cantitate infinitezimală. Transformata Fourier a modificării densității la $t = 0$, produsă de hamiltonianul extern este:

$$\delta \langle n(\vec{q}, t = 0) \rangle = \chi(\vec{q}) \cdot \delta\mu(\vec{q}) \quad (1.73)$$

unde $\chi(\vec{q})$ este funcția statică de răspuns densitate. Densitatea pentru $t > 0$ este determinată atunci de transformata Laplace - Fourier:

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = G(\vec{q}, z) \cdot \delta \langle n(\vec{q}, t = 0) \rangle = \frac{\chi(\vec{q}) \cdot \delta\mu(\vec{q})}{-iz + Dq^2} \quad (1.74)$$

Pentru a obține relația (1.74) scriem:

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle - D \cdot \nabla^2 \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle = 0$$

Cu această relație:

$$0 = \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \left[\frac{\partial}{\partial t} \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle - D \cdot \nabla^2 \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle \right]$$

sau:

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle - D \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle \right)$$

Deoarece:

$$\delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle = \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle$$

și efectuând (în al doilea termen) două integrări prin părți după variabila spațială, avem:

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle + Dq^2 \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle$$

sau:

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle + Dq^2 \delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle$$

Rezolvând această ecuație diferențială (pentru $t \geq 0$), cu condiția inițială:

$$t = 0 \rightarrow \delta \langle n(\vec{q}, t = 0) \rangle$$

obținem:

$$\delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle = \delta \langle n(\vec{q}, t = 0) \rangle \cdot e^{-Dq^2 t} \quad t \geq 0$$

Atunci:

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = \int_0^\infty dt \cdot e^{izt} \delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle$$

sau:

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = \int_0^\infty dt \cdot e^{izt} \delta \langle n(\vec{q}, t = 0) \rangle \cdot e^{-Dq^2 t}$$

Efectuând integrala elementară după t , găsim:

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = \delta \langle n(\vec{q}, t = 0) \rangle \frac{1}{-iz + Dq^2} = \frac{\chi(\vec{q}) \cdot \delta\mu(\vec{q})}{-iz + Dq^2}$$

Următorul pas este să determinăm legătura dintre $\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle$ și susceptibilitatea dinamică $\chi(\vec{q}, z)$. Din definiția lui $\tilde{\chi}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$, ec.(1.11), și deoarece:

$$\delta\mu(\vec{x}, t) = \eta(-t)e^{\epsilon t} \delta\mu(\vec{x})$$

avem:

$$\delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle = \int_{-\infty}^0 dt' \cdot \tilde{\chi}(\vec{q}, t - t') \cdot e^{\epsilon t'} \cdot \delta\mu(\vec{q}) \quad (1.75)$$

Această relație se obține pornind de la formula:

$$\delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle = \int d\vec{x}' dt' \cdot \tilde{\chi}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') \cdot \delta\mu(\vec{x}', t')$$

cu:

$$\delta\mu(\vec{x}', t') = \eta(-t') e^{\epsilon t'} \delta\mu(\vec{x}')$$

deci:

$$\delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle = \int d\vec{x}' \int_{-\infty}^0 dt' \cdot \tilde{\chi}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') \cdot e^{\epsilon t'} \cdot \delta\mu(\vec{x}')$$

Scriind în această formulă:

$$\tilde{\chi}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') = \int (d\vec{q}' / (2\pi)^d) \cdot \tilde{\chi}(\vec{q}', t - t') \cdot e^{i\vec{q}'(\vec{x} - \vec{x}')} \quad (1.11)$$

și integrând după variabila spațială \vec{x} , vom avea:

$$\begin{aligned} \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \delta \langle n(\vec{x}, t) \rangle &= \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \int_{-\infty}^0 dt' \cdot e^{\epsilon t'} \cdot \\ &\cdot \int d\vec{x}' \cdot \delta\mu(\vec{x}') \int (d\vec{q}' / (2\pi)^d) \cdot \tilde{\chi}(\vec{q}', t - t') \cdot e^{i\vec{q}'(\vec{x} - \vec{x}')} \end{aligned}$$

sau:

$$\begin{aligned} \delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle &= \int d\vec{x} \cdot e^{-i\vec{q}\vec{x}} \int_{-\infty}^0 dt' \cdot e^{\epsilon t'} \int (d\vec{q}' / (2\pi)^d) \cdot \tilde{\chi}(\vec{q}', t - t') \cdot e^{i\vec{q}'\vec{x}} \cdot \\ &\cdot \int d\vec{x}' \cdot \delta\mu(\vec{x}') \cdot e^{-i\vec{q}'\vec{x}'} \end{aligned}$$

Cum:

$$\delta\mu(\vec{q}') = \int d\vec{x}' \cdot \delta\mu(\vec{x}') \cdot e^{-i\vec{q}'\vec{x}'}$$

obținem:

$$\delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle = \int_{-\infty}^0 dt' \cdot e^{\epsilon t'} \int (d\vec{q}' / (2\pi)^d) \cdot \tilde{\chi}(\vec{q}', t - t') \cdot \delta\mu(\vec{q}') \int d\vec{x} \cdot e^{i(\vec{q}' - \vec{q})\vec{x}}$$

Aici:

$$(2\pi)^d \cdot \delta(\vec{q}' - \vec{q}) = \int d\vec{x} \cdot e^{i(\vec{q}' - \vec{q})\vec{x}}$$

și deci:

$$\delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle = \int_{-\infty}^0 dt' \cdot \tilde{\chi}(\vec{q}, t - t') \cdot e^{\epsilon t'} \cdot \delta\mu(\vec{q})$$

Folosind:

$$\tilde{\chi}(\vec{q}, t - t') = 2i \cdot \tilde{\chi}''(\vec{q}, t - t') = 2i \int \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega(t-t')} \chi''(\vec{q}, \omega)$$

obținem:

$$\delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle = \int_{-\infty}^0 dt' \int \frac{d\omega}{2\pi} \cdot 2i \chi''(\vec{q}, \omega) e^{-i\omega(t-t')} e^{\epsilon t'} \delta\mu(\vec{q})$$

Înmulțind această expresie cu e^{izt} și integrând după variabila t , vom avea:

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = \int \frac{d\omega}{\pi} \cdot i \chi''(\vec{q}, \omega) \int_0^{\infty} dt \cdot e^{izt} \int_{-\infty}^0 dt' \cdot e^{-i\omega(t-t')} e^{\epsilon t'} \delta\mu(\vec{q})$$

Aici s-a folosit relația:

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = \int_0^{\infty} dt \cdot e^{izt} \delta \langle n(\vec{q}, t) \rangle$$

Efectuând integralele după t și t' și luând limita $\epsilon \rightarrow 0$, ($\epsilon > 0$), găsim următorul rezultat:

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = \int \frac{d\omega}{i\pi} \cdot \chi''(\vec{q}, \omega) \cdot \frac{1}{z} \left(\frac{1}{\omega - z} - \frac{1}{\omega} \right) \cdot \delta\mu(\vec{q})$$

Ținând seama că:

$$\chi(\vec{q}, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\vec{q}, \omega)}{\omega - z}$$

$$\chi(\vec{q}, z=0) \equiv \chi(\vec{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\vec{q}, \omega)}{\omega}$$

Relația de mai sus devine:

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = \frac{1}{iz} [\chi(\vec{q}, z) - \chi(\vec{q})] \cdot \delta\mu(\vec{q}) \quad (1.76)$$

Funcția:

$$\Phi^R(\vec{q}, z) = \frac{1}{z} [\chi(\vec{q}, z) - \chi(\vec{q})] \quad (1.77)$$

se numește **funcția de relaxare Kubo**.

Ecuția (1.76) împreună cu (1.74):

$$\delta \langle n(\vec{q}, z) \rangle = G(\vec{q}, z) \cdot \chi(\vec{q}) \delta\mu(\vec{q})$$

implică:

$$G(\vec{q}, z) = \frac{1}{iz} \left[\frac{\chi(\vec{q}, z)}{\chi(\vec{q})} - 1 \right] \quad (1.78)$$

iar de aici, folosind expresia lui $G(\vec{q}, z)$, obținem:

$$\chi(\vec{q}, z) = \chi(\vec{q}) \frac{Dq^2}{-iz + Dq^2} \quad (1.79)$$

Funcția de răspuns are exact forma corespunzătoare oscilatorului superamortizat (1.53) atît doar că inversul timpului de atenuare Dq^2 depinde aici de numărul de undă. Partea imaginară a lui $\chi(\vec{q}, \omega)$ este:

$$\frac{\chi''(\vec{q}, \omega)}{\omega} = \chi(\vec{q}) \cdot \frac{Dq^2}{\omega^2 + (Dq^2)^2} \quad (1.80)$$

Aceasta este o Lorentziană cu intensitatea integrală $\chi(\vec{q})$, înălțimea $\chi(\vec{q})/Dq^2$ și cu o lărgime care tinde spre zero cînd $q \rightarrow 0$, după cum se vede în Fig.1.6

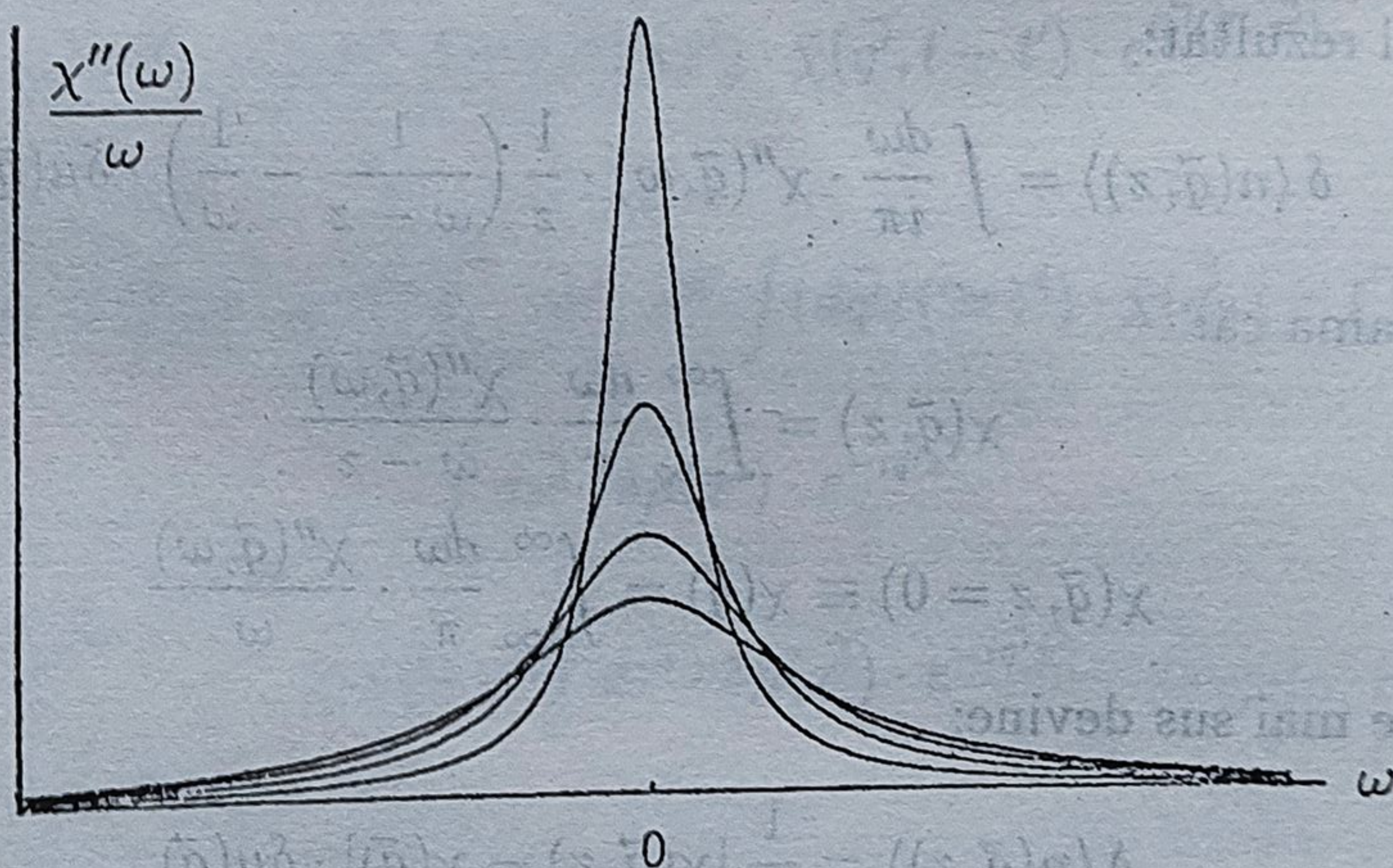


Fig.1.6 $\chi''(\omega)/\omega$ pentru diferite valori a lui q .

La fel ca și în cazul oscilatorului armonic, funcția disipativă $\chi''(\vec{q}, \omega)$ este legată de funcția de corelație $S(\vec{q}, \omega)$ prin teorema fluctuație-disipație, care în limita clasică este:

$$\frac{\chi''(\vec{q}, \omega)}{\omega} = \frac{S(\vec{q}, \omega)}{2T} \quad (1.81)$$

Momentul de ordinul doi pentru $\chi''(\vec{q}, \omega)/\omega$ este atunci:

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \omega^2 \cdot \frac{\chi''(\vec{q}, \omega)}{\omega} = \frac{1}{T} \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega^2 S(\vec{q}, \omega) = \frac{nq^2}{m} \quad (1.82)$$

unde m este masa particulei care difuzează.

Proprietățile formale a funcțiilor de răspuns

Răspunsul la câmpuri externe

În paragrafele de început am definit funcția de răspuns dinamică $\tilde{\chi}_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$ care leagă abaterea $\delta \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle$ a mediei câmpului $\phi_i(\vec{x}, t)$, față de valoarea sa de echilibru, cu modificarea câmpului exterior dependent de timp $h_j(\vec{x}', t')$, care este conjugatul termodinamic al lui $\phi_j(\vec{x}', t')$. Am văzut apoi cum putem calcula această funcție, folosindu-ne de ecuații de mișcare fenomenologice. În acest paragraf vom prezenta formalismul general pentru funcțiile de răspuns dinamice. Rezultatul important care se desprinde din tratarea generală este că funcțiile de răspuns pot fi exprimate prin medii ale comutatorilor operatorilor. De aici rezultă proprietățile de simetrie ale funcțiilor de răspuns, precum și teorema fluctuație-disipație (sub forma cea mai generală). Întreaga tratare va fi cuantică, dar rezultatele clasice se obțin ușor, trecînd la limita clasică a mecanicii cuantice.

Hamiltonianul sistemului, în prezența câmpului exterior $h_j(\vec{x}, t)$ poate fi scris ca:

$$H_T = H + H_{ext} \quad (1.83)$$

unde H descrie sistemul atunci cînd h_j este zero, iar:

$$H_{ext} = - \int d^d x \sum_j \phi_j(\vec{x}) h_j(\vec{x}, t) \quad (1.84)$$

(În reprezentarea Schrödinger $\phi_j(\vec{x})$ nu depinde de timp). H_{ext} este o perturbare produsă pentru a măsura mai apoi răspunsul sistemului. Sîntem interesați de limita cînd $h_j(\vec{x}, t) \rightarrow 0$ și mai considerăm că $h_j(\vec{x}, t)$ este zero pentru momente de timp anterioare lui t_0 (cărui îi vom putea totuși permite să tindă la $-\infty$).

Valoarea medie a operatorilor, în prezența câmpului exterior, este:

$$\langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_h = \text{Tr} \{ \rho_h(t, t_0) \phi_i(\vec{x}, t_0) \} \quad (1.85)$$

unde $\rho_h(t, t_0)$ este matricea densitate dependentă de timp, pentru $h_j(\vec{x}, t)$ diferit de zero. Ea se reduce la matricea densitate de echilibru $\rho_e (h = 0)$ pentru momente de timp anterioare lui t_0 . Evoluția în timp a lui $\rho_h(t, t_0)$ este guvernată de ecuația:

$$i\hbar \frac{\partial \rho_h}{\partial t} = [H + H_{ext}, \rho_h] \quad (1.86)$$

cu condiția inițială:

$$\rho_h(t_0, t_0) = \rho_e \equiv \rho$$

și unde:

$$\rho_h(t, t_0) = U(t, t_0) \rho U^{-1}(t, t_0) \quad (1.87)$$

$U(t, t_0)$ este operatorul de evoluție, care verifică ecuația:

$$i\hbar \frac{dU(t, t_0)}{dt} = (H + H_{ext}) U(t, t_0) \quad (1.88)$$

cu condiția inițială: $U(t_0, t_0) = 1$. În plus:

$$U(t, t_0) U^{-1}(t, t_0) = 1$$

Datorită proprietății de invarianță a urmei la permutarea ciclică a factorilor, ecuația (1.85) poate fi scrisă și astfel:

$$\begin{aligned} \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_h &= \text{Tr} \{ U(t, t_0) \rho U^{-1}(t, t_0) \phi_i(\vec{x}, t_0) \} = \\ &= \text{Tr} \{ \rho U^{-1}(t, t_0) \phi_i(\vec{x}, t_0) U(t, t_0) \} \end{aligned} \quad (1.89)$$

Pentru a discuta dependența de timp a lui $\phi_i(\vec{x}, t)$ când h_j este diferit de zero este convenabil să introducem reprezentarea de interacție pentru $U(t, t_0)$ prin:

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) U'(t, t_0) \quad (1.90)$$

unde:

$$U'(t_0, t_0) = 1$$

și:

$$i\hbar \frac{dU_0}{dt} = HU_0 \quad (1.91)$$

De aici, folosind și ecuațiile (1.88) și (1.90), avem:

$$i\hbar \frac{d}{dt} [U_0(t, t_0)U'(t, t_0)] = (H + H_{ext}) U_0(t, t_0)U'(t, t_0)$$

$$i\hbar \frac{dU_0}{dt} U' + U_0 i\hbar \frac{dU'}{dt} = (H + H_{ext}) U_0 U'$$

$$HU_0 U' + U_0 i\hbar \frac{dU'}{dt} = (H + H_{ext}) U_0 U'$$

Inmulțind această relație la stînga cu U_0^{-1} obținem:

$$i\hbar \frac{dU'}{dt} = [U_0^{-1} H_{ext} U_0] \cdot U' \equiv H_{ext}^I \cdot U' \quad (1.92)$$

unde I indică faptul că H_{ext}^I este exprimat în reprezentarea de interacție. Pentru a obține $U'(t, t_0)$, ca o serie de puteri a lui H_{ext}^I , vom integra ecuația (1.92). Rezolvînd această problemă iterativ avem:

$$i\hbar \frac{dU'}{dt} = H_{ext}^I U'$$

iar:

$$U'(t, t_0) = U'_1(t, t_0) + U'_2(t, t_0) + \dots$$

cu:

$$U'_1(t, t_0) = 1$$

Imediat vom obține:

$$U'(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H_{ext}^I(t') dt' + \dots \quad (1.93)$$

Definind acum $\phi_i^I(\vec{x}, t)$ ca fiind un operator în reprezentarea de interacție:

$$\phi_i^I(\vec{x}, t) = U_0^{-1}(t, t_0) \phi_i(\vec{x}, t_0) U_0(t, t_0)$$

putem scrie:

$$\langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_h = Tr\{\rho_h \phi_i\} = Tr\{U \rho U^{-1} \phi_i\} = Tr\{\rho U^{-1} \phi_i U\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \text{Tr}\{\rho(U_0 U')^{-1} \phi_i(U_0 U')\} = \text{Tr}\{\rho U'^{-1} U_0^{-1} \phi_i U_0 U'\} = \\
&= \text{Tr}\{\rho U'^{-1}(t, t_0) \phi_i^I(\vec{x}, t) U'(t, t_0)\} = \\
&\simeq \text{Tr}\left\{\rho \left(1 - \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H_{ext}^I(t') dt'\right) \phi_i^I(\vec{x}, t) \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H_{ext}^I(t') dt'\right)\right\}
\end{aligned}$$

Notînd:

$$A = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t H_{ext}^I(t') dt' \quad B = \phi_i^I(\vec{x}, t)$$

vedem că în formula de mai sus apare expresia:

$$(1 - A)B(1 + A) = B + BA - AB - ABA \simeq B + [B, A]$$

unde am considerat termenul de ordinul $(H_{ext}^I)^2$ ca fiind neglijabil. Atunci avem:

$$\langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_h \simeq \text{Tr}\{\rho \phi_i^I(\vec{x}, t)\} + \text{Tr}\left\{\rho \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' [\phi_i^I(\vec{x}, t), H_{ext}^I(t')]\right)\right\} \quad (1.94)$$

Primul termen din această relație este valoarea medie de echilibru în absența câmpului exterior h_j , iar cel de-al doilea termen reflectă efectul câmpului exterior, în ordinul cel mai scăzut (liniar) în h_j . Introducînd $\delta \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle$ prin:

$$\begin{aligned}
\delta \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle &= \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_h - \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle = \\
&= \text{Tr}\left\{\rho \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' [\phi_i^I(\vec{x}, t), H_{ext}^I(t')]\right)\right\}
\end{aligned}$$

cu:

$$H_{ext}^I(t') = - \int d^d x' \sum_j \phi_j^I(\vec{x}', t') h_j(\vec{x}', t')$$

și considerînd $t_0 \rightarrow -\infty$, obținem:

$$\delta \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^d x' \sum_j \frac{i}{\hbar} \eta(t - t') \langle [\phi_i(\vec{x}, t), \phi_j(\vec{x}', t')] \rangle h_j(\vec{x}', t') \quad (1.95)$$

unde indicele superior I a fost lăsat la o parte și unde $\langle \dots \rangle$ înseamnă medierea cu ajutorul matricii de densitate de echilibru ρ . Comparînd (1.95) cu ecuația (1.11) (unde sumarea după j este subînțeleasă), avem:

$$\tilde{\chi}_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') = \eta(t - t') \frac{i}{\hbar} \langle [\phi_i(\vec{x}, t), \phi_j(\vec{x}', t')] \rangle \quad (1.96)$$

și cum:

$$\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') = 2i\eta(t - t')\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t')$$

obținem:

$$\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') = \frac{1}{2\hbar} \langle [\phi_i(\vec{x}, t), \phi_j(\vec{x}', t')] \rangle \quad (1.97)$$

Aceste ecuații ne dau expresiile căutate pentru $\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}$ și $\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}$ ca funcție de media unor produse de operatori.

Proprietăți de simetrie a funcțiilor de răspuns

Avem un anumit număr de proprietăți de simetrie pentru $\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t')$, care rezultă direct din faptul că partea imaginară a funcției de răspuns este media de echilibru a unui comutator. Ea trebuie să fie **antisimetrică** la interschimbarea tuturor indicilor:

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') &= -\tilde{\chi}''_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, t' - t) \\ \chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) &= -\chi''_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, -\omega) \end{aligned} \quad (1.98)$$

Cîmpurile $\phi_i(\vec{x}, t)$ sînt operatori hermitici. Din acest motiv:

$$\begin{aligned} [\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t')]^* &= \left(\frac{1}{2\hbar} \langle [\phi_i(\vec{x}, t), \phi_j(\vec{x}', t')] \rangle \right)^* = \\ &= \frac{1}{2\hbar} \langle [\phi_j(\vec{x}', t'), \phi_i(\vec{x}, t)] \rangle \end{aligned} \quad (1.99)$$

și:

$$[\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t')]^* = \tilde{\chi}''_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, t' - t) \quad (1.100)$$

sau, din ecuația (1.98):

$$[\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t')]^* = -\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t') \quad (1.101)$$

In final, folosind (1.100) obținem:

$$[\chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)]^* = \chi''_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, \omega) \quad (1.102)$$

Din (1.98) și (1.102) rezultă că dacă $\chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$ este **par** la interschimbarea (\vec{x}, i) cu (\vec{x}', j) , atunci el este **real** și **impar** în ω . Dacă însă este **impar** la aceeași interschimbare, atunci el este **imaginar** și **par** în ω . Primul caz este cel mai adesea întâlnit, dar este posibil ca și cel de-al doilea să apară. Comportamentul câmpurilor $\phi_i(\vec{x}, t)$ și al matricii de densitate ρ , la inversia temporală, vor determina următoarele proprietăți de simetrie a lui $\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t')$. Operatorul de inversie temporală T este un operator antiunitar. Dacă $|Ta\rangle$ și $|Tb\rangle$ sînt stările după inversia temporală, corespunzătoare lui $|a\rangle$ și $|b\rangle$, atunci $\langle Ta|Tb\rangle = \langle b|a\rangle$. Inversia temporală aplicată unui operator ϕ_i duce la un nou operator:

$$\phi'_i = T\phi_i T^{-1}$$

Cînd se aplică produsului de operatori, conduce la inversarea ordinii:

$$\phi_i\phi_j \rightarrow (\phi_i\phi_j)' = \phi'_j\phi'_i$$

Cîmpurile $\phi_i(\vec{x}, t)$ pot fi clasificate în acord cu semnatura lor, $\epsilon_{\phi_i} = \pm 1$, în raport cu inversia temporală:

$$\phi'_i(\vec{x}, t) = T\phi_i(\vec{x}, t)T^{-1} = \epsilon_{\phi_i}\phi_i(\vec{x}, -t) \quad (1.103)$$

Operatori cum ar fi densitatea de energie sînt pari ($\epsilon = 1$), în timp ce densitatea de impuls și magnetizarea sînt impari ($\epsilon = -1$) la inversia temporală. Matricea de densitate depinde de cîmpurile exterioare aplicate (cum ar fi cîmpurile magnetice) și de natura ordinii din sistem. Astfel, în absența cîmpurilor exterioare care strică simetria la inversia temporală și în stări unde nu avem parametru de ordine care să strice inversia temporală, ρ este invariant la operația de inversie temporală. Dacă însă există cîmpuri exterioare, cum ar fi cîmpul magnetic, sau parametrii de ordine care strică inversia temporală, atunci ρ nu mai este invariant la această operație. Fie B cîmpul sau parametrul de ordine care își schimbă semnul la inversia temporală. Aplicarea legilor de mai sus, pentru operatorul inversie temporală, conduce la:

$$\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t', B) = -\epsilon_{\phi_i}\epsilon_{\phi_j}\tilde{\chi}''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t' - t, -B)$$

$$= \epsilon_{\phi_i}\epsilon_{\phi_j}\tilde{\chi}''_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, t - t', -B)$$

$$\chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega, B) = -\epsilon_{\phi_i}\epsilon_{\phi_j}\chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', -\omega, -B)$$

$$= \epsilon_{\phi_i} \epsilon_{\phi_j} \chi''_{\phi_j \phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, \omega, -B) \quad (1.104)$$

Cînd nu avem cîmp exterior sau parametru de ordine care să strice invarianța la inversia temporală, ecuațiile (1.98), (1.100) și (1.104) implică faptul că $\chi''_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$ este real, impar în ω și simetric la interschimbarea (\vec{x}, i) cu (\vec{x}', j) cînd ϕ_i și ϕ_j au același semn la inversia temporală; și imaginar, par în ω și antisimetric la interschimbarea (\vec{x}, i) cu (\vec{x}', j) cînd ϕ_i și ϕ_j au semne opuse. Proprietățile de simetrie pentru $\chi'_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$ rezultă din:

$$\chi'_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \cdot \frac{\chi''_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega')(\omega' + \omega)}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (1.105)$$

De exemplu, pentru $B = 0$, $\chi'_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$ este real, par în ω și simetric la interschimbarea (\vec{x}, i) cu (\vec{x}', j) cînd $\epsilon_{\phi_i} = \epsilon_{\phi_j}$.

În plus, pe lîngă simetriile temporale, există deasemenea simetrii implicînd coordonatele spațiale. De exemplu, în sisteme izotrope și omogene, $\chi''_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t - t')$ trebuie să fie funcție numai de $|\vec{x} - \vec{x}'|$, iar transformata Fourier spațială corespunzătoare lui trebuie să fie funcție numai de $q = |\vec{q}|$. În sistemele cristaline mai complicate, simetriile de grup, punctuale și spațiale, conduc la alte simetrii spațiale pentru $\chi''_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$.

Disipația

În discuția referitoare la oscilatorul armonic am găsit că puterea disipată era proporțională cu $\omega \chi''(\omega)$. Acum vom arăta că acest rezultat are o valabilitate mai generală. Rata cu care este efectuat lucru asupra sistemului poate fi calculată folosind o generalizare a ecuației (1.57). Rata dW/dt cu care cîmpul exterior $h_i(\vec{x}, t)$ lucrează asupra sistemului este egală cu rata de modificare a energiei totale a sistemului:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d}{dt} \text{Tr} \{ \rho(t) H_T \} = \text{Tr} \left\{ \rho(t) \frac{dH_T}{dt} \right\} + \text{Tr} \left\{ \frac{d\rho(t)}{dt} H_T \right\}$$

În reprezentarea Schrödinger, cîmpurile $\phi_i(\vec{x})$ nu depind de timp, și:

$$\frac{dH_T}{dt} = \frac{dH_{\text{ext}}}{dt}$$

In plus:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ \frac{d\rho(t)}{dt} H_T \right\} &= \text{Tr} \left\{ \frac{1}{i\hbar} [H_T, \rho] \cdot H_T \right\} = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \{ [H_T, \rho] \cdot H_T \} = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \{ \rho [H_T, H_T] \} = 0 \end{aligned}$$

Atunci, rata cu care este efectuat lucru asupra sistemului este:

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} &= \text{Tr} \left\{ \rho(t) \frac{dH_{ext}}{dt} \right\} = \text{Tr} \left\{ \rho(t) \cdot (-1) \int d^d x \sum_i \phi_i(\vec{x}) \dot{h}_i(\vec{x}, t) \right\} = \\ &= - \int d^d x \sum_i \text{Tr} \{ \rho(t) \phi_i(\vec{x}) \} \dot{h}_i(\vec{x}, t) = - \int d^d x \sum_i \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_h \dot{h}_i(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (1.106)$$

Aici:

$$\langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_h = \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\phi_i(\vec{x}, t), H_{ext}(t')] \rangle$$

cu:

$$H_{ext}(t') = - \int d^d x' \sum_j \phi_j(\vec{x}') h_j(\vec{x}', t')$$

deci:

$$\langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_h = \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_0 + 2i \int d^d x' \int_{-\infty}^t dt' \sum_j \tilde{\chi}_{\phi_i \phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t - t') h_j(\vec{x}', t') \quad (1.107)$$

In obținerea relației (1.107) s-a mai folosit:

$$\langle [\phi_i(\vec{x}, t), \phi_j(\vec{x}', t')] \rangle = 2\hbar \cdot \tilde{\chi}_{\phi_i \phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t - t')$$

Inlocuind (1.107) în (1.106) avem:

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} &= - \sum_i \int d^d x \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle_0 \dot{h}_i(\vec{x}, t) - \\ &- \sum_{ij} \int d^d x \int d^d x' \int_{-\infty}^t dt' \dot{h}_i(\vec{x}, t) \cdot 2i \tilde{\chi}_{\phi_i \phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t - t') h_j(\vec{x}', t') \end{aligned} \quad (1.108)$$

Vom considera un câmp exterior care oscilează cu frecvența ω :

$$h_i(\vec{x}, t) = \text{Re} (h_i(\vec{x}) e^{-i\omega t}) = \frac{1}{2} [h_i(\vec{x}) e^{-i\omega t} + h_i^*(\vec{x}) e^{i\omega t}] \quad (1.109)$$

Atunci:

$$\dot{h}_i(\vec{x}, t) = \frac{i\omega}{2} [h_i^*(\vec{x})e^{i\omega t} - h_i(\vec{x})e^{-i\omega t}]$$

iar (1.108) va deveni:

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} = & - \sum_{ij} \int d^d x \cdot d^d x' \frac{1}{4} \left\{ \int_{-\infty}^t dt' i\omega [h_i^*(\vec{x})e^{i\omega t'} - h_i(\vec{x})e^{-i\omega t'}] \cdot \right. \\ & \left. \cdot 2i\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t-t') [h_j^*(\vec{x}')e^{i\omega t'} + h_j(\vec{x}')e^{-i\omega t'}] \right\} \end{aligned} \quad (1.110)$$

unde primul termen din (1.110) a fost suprimat deoarece el va dispărea oricum atunci cînd facem medierea pe o perioadă a cîmpului exterior. După efectuarea medierii obținem:

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} = & -\frac{i\omega}{4} \sum_{ij} \int_{-\infty}^t dt' \int d^d x \cdot d^d x' [2ih_i^*(\vec{x})\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t-t')h_j(\vec{x}')e^{i\omega(t-t')} - \\ & - 2ih_i(\vec{x})\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t-t')h_j^*(\vec{x}')e^{-i\omega(t-t')}] \end{aligned} \quad (1.111)$$

deoarece termenii proporționali cu $e^{\pm i\omega(t+t')}$ dispar în urma medierii. Făcînd schimbarea de variabilă: $t_1 = t - t'$ obținem:

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} = & \frac{\omega}{2} \sum_{ij} \int d^d x \cdot d^d x' \int_0^\infty dt_1 [h_i^*(\vec{x})\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t_1)h_j(\vec{x}')e^{i\omega t_1} - \\ & - h_i(\vec{x})\tilde{\chi}_{\phi_i\phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', t_1)h_j^*(\vec{x}')e^{-i\omega t_1}] \end{aligned} \quad (1.112)$$

Apoi, interschimbînd (\vec{x}, i) cu (\vec{x}, j) , punînd $t_1 \rightarrow -t_1$ în cel de-al doilea termen al acestei expresii și folosind proprietățile de simetrie din ec.(1.98), găsim:

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\omega}{2} \sum_{ij} \int d^d x \cdot d^d x' \cdot h_i^*(\vec{x})\chi_{\phi_i\phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', \omega) \cdot h_j(\vec{x}') \quad (1.113)$$

Pentru sisteme în echilibru termic, puterea este absorbită de la surse externe, iar dW/dt trebuie să fie pozitiv definit. Astfel, $\omega\chi_{\phi_i\phi_j}''(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$ este o cantitate pozitiv definită.

Reprezentări spectrale pentru $\chi''_{\phi_i \phi_j}$

Adesea este folositor să cunoaștem exprimarea lui $\chi''_{\phi_i \phi_j}$ în funcție de elementele de matrice a lui $\phi_i(\vec{x}, t)$ corespunzătoare stărilor proprii ale energiei sistemului. Fie $|n\rangle$ o stare proprie a lui H cu energia $\hbar\omega_n$ și considerăm că ρ este diagonal, avînd elementele de matrice:

$$\langle n|\rho|m\rangle = \rho_n \cdot \delta_{nm}$$

Atunci putem scrie:

$$\begin{aligned} \langle [\phi_i(\vec{x}, t), \phi_j(\vec{x}', 0)] \rangle &= \text{Tr} \left\{ \rho \left[e^{\frac{iHt}{\hbar}} \phi_i(\vec{x}, 0) e^{-\frac{iHt}{\hbar}}, \phi_j(\vec{x}', 0) \right] \right\} = \\ &= \sum_n \rho_n \langle n | \phi_i(\vec{x}, t) \phi_j(\vec{x}', 0) - \phi_j(\vec{x}', 0) \phi_i(\vec{x}, t) | n \rangle = \\ &= \sum_{nm} \rho_n \left\{ \langle n | \phi_i(\vec{x}, t) | m \rangle \langle m | \phi_j(\vec{x}', 0) | n \rangle - \langle n | \phi_j(\vec{x}', 0) | m \rangle \langle m | \phi_i(\vec{x}, t) | n \rangle \right\} = \\ &= \sum_{nm} \rho_n \left\{ \langle n | e^{\frac{iHt}{\hbar}} \phi_i(\vec{x}, 0) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | m \rangle \langle m | \phi_j(\vec{x}', 0) | n \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \langle n | \phi_j(\vec{x}', 0) | m \rangle \langle m | e^{\frac{iHt}{\hbar}} \phi_i(\vec{x}, 0) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | n \rangle \right\} = \\ &= \sum_{nm} \rho_n \left\{ e^{i(\omega_n - \omega_m)t} \langle n | \phi_i(\vec{x}, 0) | m \rangle \langle m | \phi_j(\vec{x}', 0) | n \rangle - \right. \\ &\quad \left. - e^{-i(\omega_n - \omega_m)t} \langle n | \phi_j(\vec{x}', 0) | m \rangle \langle m | \phi_i(\vec{x}, 0) | n \rangle \right\} \end{aligned} \quad (1.114)$$

În obținerea relației (1.114) s-a folosit:

$$\langle n | e^{\frac{iHt}{\hbar}} = \langle n | e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} = \langle n | e^{i\omega_n t}$$

$$e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | m \rangle = e^{-\frac{iE_m t}{\hbar}} | m \rangle = e^{i\omega_m t} | m \rangle$$

Relația (1.114) implică:

$$\begin{aligned} \chi''(\vec{x}, \vec{x}', \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \tilde{\chi}''(\vec{x}, \vec{x}', t) = \frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \langle [\phi_i(\vec{x}, t), \phi_j(\vec{x}', 0)] \rangle = \\ &= \frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} \sum_{nm} \rho_n \left\{ e^{i(\omega_n - \omega_m)t} \langle n | \phi_i(\vec{x}, 0) | m \rangle \langle m | \phi_j(\vec{x}', 0) | n \rangle - \right. \end{aligned}$$

$$-e^{-i(\omega_n - \omega_m)t} \langle n | \phi_j(\vec{x}', 0) | m \rangle \langle m | \phi_i(\vec{x}, 0) | n \rangle \}$$

Intervertind, în expresia de mai sus, integrarea cu sumarea și folosind:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i(\omega + \omega_n - \omega_m)t} = 2\pi \delta(\omega + \omega_n - \omega_m)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i(\omega - \omega_n + \omega_m)t} = 2\pi \delta(\omega - \omega_n + \omega_m)$$

obținem:

$$\begin{aligned} \chi''(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = & \frac{\pi}{\hbar} \sum_{nm} \rho_n \left\{ \langle n | \phi_i(\vec{x}, 0) | m \rangle \langle m | \phi_j(\vec{x}', 0) | n \rangle \delta(\omega + \omega_n - \omega_m) - \right. \\ & \left. - \langle n | \phi_j(\vec{x}', 0) | m \rangle \langle m | \phi_i(\vec{x}, 0) | n \rangle \delta(\omega - \omega_n + \omega_m) \right\} \end{aligned} \quad (1.115)$$

Dacă $\phi_i(\vec{x}, t) = \phi(t)$ (independentă de \vec{x} și i), ecuația (1.115) se reduce, în ansamblul canonic, la:

$$\chi''(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{nm} \frac{e^{-\beta \hbar \omega_n}}{Z} \cdot |\langle n | \phi | m \rangle|^2 [\delta(\omega + \omega_n - \omega_m) - \delta(\omega - \omega_n + \omega_m)] \quad (1.116)$$

unde: $Z = \sum_n e^{-\beta \hbar \omega_n}$ este funcția de partiție, iar $\beta = 1/T$. Astfel, $\chi''_{\phi_i \phi_j}$ constă dintr-o serie de funcții delta, ponderate cu matricea de densitate de echilibru și elementele de matrice $\langle n | \phi_i(\vec{x}, 0) | m \rangle$. Aceasta implică faptul că funcția de răspuns complexă are poli de-a lungul axei reale, la frecvențele $\pm(\omega_n - \omega_m)$, corespunzătoare frecvențelor de excitație posibile ale sistemului. Intr-adevăr, transpunând relația (1.17) pentru cazul acesta, avem:

$$\begin{aligned} \chi_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', z) = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \frac{\chi''_{\phi_i \phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)}{\omega - z} = \\ = & \sum_{nm} \frac{\rho_n}{\hbar} \left\{ \frac{\langle n | \phi_i(\vec{x}, 0) | m \rangle \langle m | \phi_j(\vec{x}', 0) | n \rangle}{\omega_m - \omega_n - z} - \frac{\langle n | \phi_j(\vec{x}', 0) | m \rangle \langle m | \phi_i(\vec{x}, 0) | n \rangle}{\omega_n - \omega_m - z} \right\} \end{aligned} \quad (1.117)$$

Pentru un sistem cu dimensiuni finite există o energie de excitație minimă și, corespunzător, o distanță minimă între polii lui $\chi(z)$, după cum se vede în figură.

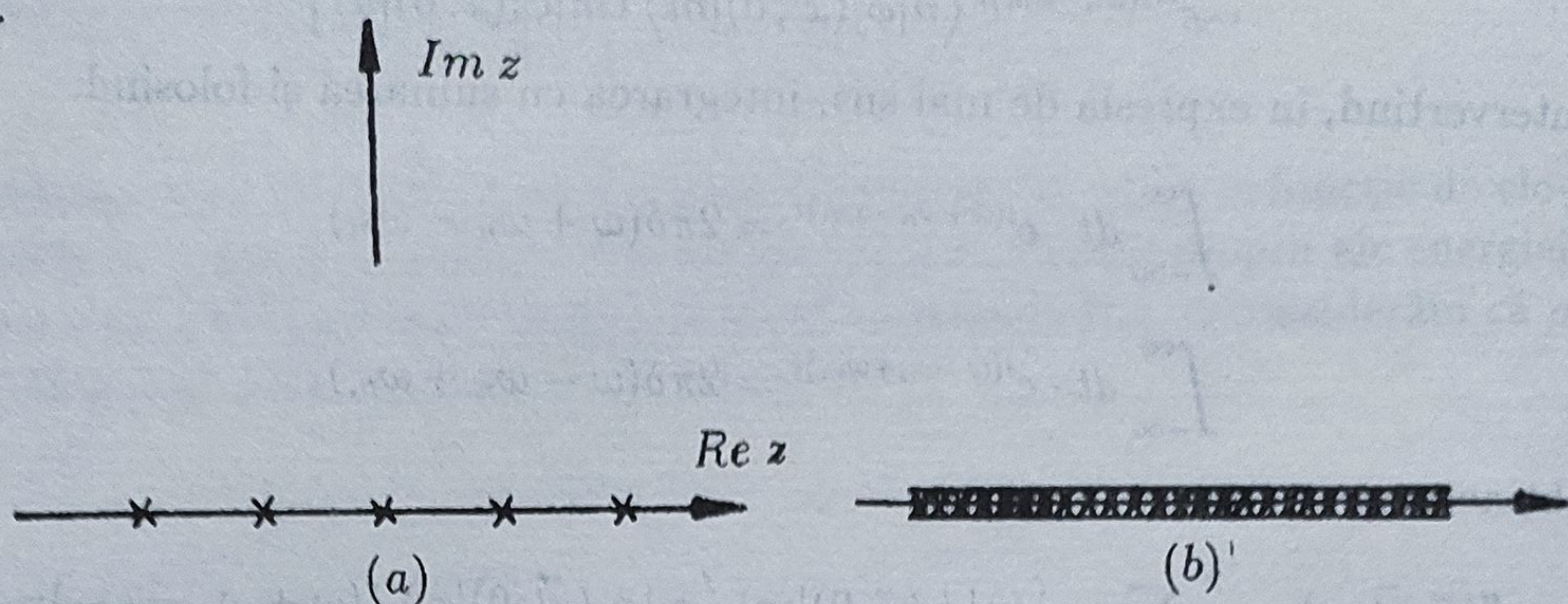


Fig.1.7 (a) Structura polilor lui $\chi(z)$ pentru sisteme finite. Există poli pe axa reală, separați printr-o distanță minimă. $\chi(z)$ este analitică peste tot în planul complex z , cu excepția acestor poli și, în particular, este analitică în semiplanul superior.

(b) Structura singularităților pentru un sistem infinit. Polii se unesc formînd o tăietură care desparte cele două semiplane. $\chi(z)$ rămîne analitică în semiplanul superior.

Cînd lungimea caracteristică a sistemului L tinde la infinit, așa cum se întîmplă în majoritatea cazurilor din fizica stării condensate, distanța dintre nivelurile energetice tinde la zero, ca L^{-2} . În acest caz polii lui $\chi(z)$ devin din ce în ce mai apropiați pînă cînd, în final, cînd $L \rightarrow \infty$, setul de poli discreți devine o tăietură. $\chi(z)$ definită prin (1.117) este o funcție analitică pentru z în semiplanul superior sau în semiplanul inferior. Oricum însă, ea are valori diferite pe cele două părți ale tăieturii:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi(\omega + i\epsilon) \neq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi(\omega - i\epsilon) \quad (1.118)$$

Fiecare pol a lui $\chi(z)$ corespunde unei funcții delta din $\chi''(\omega)$. Astfel, într-un sistem finit, $\chi''(\omega)$ va consta din picuri separate și a căror mărime este determinată de elementele de matrice din ecuația (1.117), după cum se vede în figura 1.8 (a). Cînd $L \rightarrow \infty$, picurile trec într-o curbă continuă, figura 1.8 (b), care poate să aibă forma de Lorentziană.

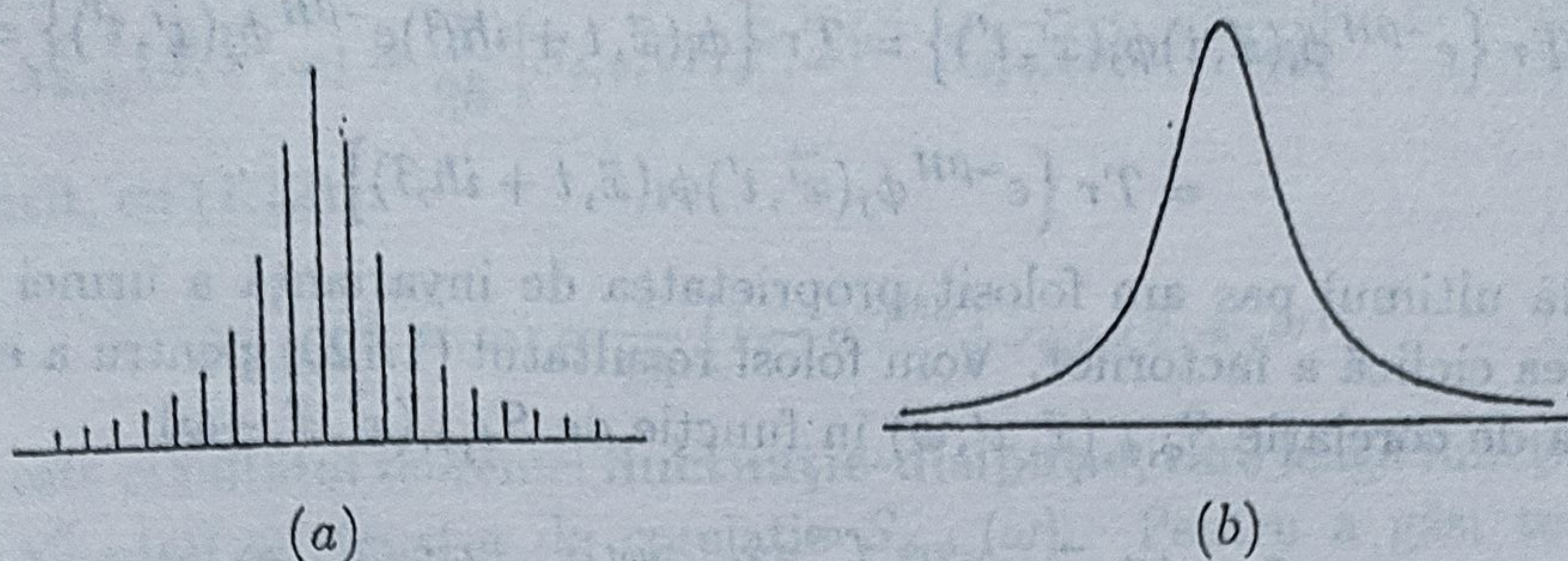


Fig.1.8 (a) $\chi''(\omega)$ constînd dintr-un set de funcții delta corespunzătoare structurii polilor din Fig.1.7 (a).

(b) $\chi''(\omega)$ cînd $L \rightarrow \infty$ (corespunzînd tăieturii din Fig.1.7 (b)).

Teorema fluctuație-disipație

Vom considera sisteme în echilibru termic, iar pentru simplitate vom considera numai sisteme descrise de matricea de densitate canonică:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad Z = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\} \quad (1.119)$$

O posibilă cale de a demonstra teorema constă în a observa că $e^{-\beta H}$ este un operator de translație cu timp imaginar. Atunci putem scrie:

$$\text{Tr}\{e^{-\beta H} \phi_i(\vec{x}, t) \phi_j(\vec{x}', t')\} = \text{Tr}\{e^{-\beta H} \phi_i(\vec{x}, t) e^{\beta H} e^{-\beta H} \phi_j(\vec{x}', t')\}$$

Deoarece:

$$\phi_i(\vec{x}, t + \tau) = e^{\frac{iH\tau}{\hbar}} \phi_i(\vec{x}, t) e^{-\frac{iH\tau}{\hbar}}$$

și identificînd:

$$\frac{i\tau}{\hbar} = -\beta \rightarrow \tau = i\hbar\beta$$

observăm că:

$$e^{-\beta H} \phi_i(\vec{x}, t) e^{\beta H} = \phi_i(\vec{x}, t + i\hbar\beta)$$

și:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \phi_i(\vec{x}, t) \phi_j(\vec{x}', t') \} &= \text{Tr} \{ \phi_i(\vec{x}, t + i\hbar\beta) e^{-\beta H} \phi_j(\vec{x}', t') \} = \\ &= \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \phi_j(\vec{x}', t') \phi_i(\vec{x}, t + i\hbar\beta) \} \end{aligned} \quad (1.120)$$

unde la ultimul pas am folosit proprietatea de invarianță a urmei la permutarea ciclică a factorilor. Vom folosi rezultatul (1.120) pentru a exprima funcția de corelație $S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$ în funcție de $S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, -\omega)$:

$$S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, 0)$$

($t' = 0$), iar:

$$S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = C_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') - \langle \phi_i(\vec{x}, t) \rangle \langle \phi_j(\vec{x}', t') \rangle$$

și:

$$C_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \langle \phi_i(\vec{x}, t) \phi_j(\vec{x}', t') \rangle$$

Atunci, ținînd seama și de cele afirmate la începutul acestui capitol:

$$\begin{aligned} S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') &= \langle \phi_j(\vec{x}', t') \phi_i(\vec{x}, t + i\hbar\beta) \rangle - \langle \phi_i(\vec{x}) \rangle \langle \phi_j(\vec{x}') \rangle = \\ &= S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, t', t + i\hbar\beta) \equiv S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, t' - t - i\hbar\beta) \end{aligned}$$

și:

$$S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', t, 0) = S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, -t - i\hbar\beta)$$

deci:

$$S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \cdot e^{i\omega t} S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, -t - i\hbar\beta)$$

Facem schimbarea de variabilă:

$$\tilde{t} = -t - i\hbar\beta$$

și avem:

$$S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{t} \cdot S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, \tilde{t}) e^{\beta\hbar\omega} e^{-i\omega\tilde{t}}$$

Renotînd $\tilde{t} \rightarrow t$ vedem că se găsește:

$$S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = e^{\beta\hbar\omega} S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, -\omega) \quad (1.121)$$

Prin definiție:

$$\chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \frac{1}{2\hbar} [S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) - S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, -\omega)] \quad (1.122)$$

astfel încît, cu (1.121):

$$\chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) \quad (1.123)$$

Acesta este rezultatul teoremei **fluctuație-disipație**, care leagă funcția disipativă $\chi''_{\phi_i\phi_j}(\omega)$ cu funcția de corelație $S_{\phi_i\phi_j}(\omega)$. Pentru a găsi teorema fluctuație-disipație în limita clasică, impunem în (1.123) $\hbar \rightarrow 0$:

$$\chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \frac{\beta\omega}{2} \cdot S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) \quad (1.124)$$

Probleme

1.1 Partea imaginară a funcției de răspuns pentru un sistem este:

$$\chi''(\omega) = \frac{a\omega}{\omega^2 + \omega_0^2}$$

- Calculați $\tilde{\chi}''(t)$ și arătați că $\tilde{\chi}''(t) = -\tilde{\chi}''(-t)$.
- Determinați $\chi(z)$ pentru $\text{Im } z > 0$ și pentru $\text{Im } z < 0$.
- Găsiți $\chi'(\omega)$ calculînd $\chi(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi(\omega + i\epsilon)$, și determinați $\sigma'(\omega)$

dacă:

$$\sigma''(\omega) = \frac{\sigma\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}$$

este partea imaginară a conductivității dinamice.

- Calculați $\tilde{\chi}(t)$, iar apoi folosind rezultatul obținut regăsiți expresia lui $\chi(z)$ pentru $\text{Im } z > 0$.

e) Calculați:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi(\omega)$$

și:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\omega')}{\omega'}$$

și stabiliți legătura între aceste expresii.

f) Folosind expresia lui $\chi(z)$ pentru $\text{Im } z > 0$ calculați $\tilde{\chi}(t)$ reobținând rezultatul de la punctul d).

g) Folosind expresia lui $\chi''(\omega)$ și relația Kramers-Kronig reobțineți $\chi'(\omega)$.

h) Arătați că:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\chi(\omega + i\epsilon) - \chi(\omega - i\epsilon)] = 2i\chi''(\omega)$$

1.2 Pornind de la faptul că:

$$\chi''(\omega) \sim \omega$$

obțineți, folosind relațiile Kramers-Kronig, expresia pentru $\chi'(\omega)$.

1.3 Pentru un comportament de tip difuziv a particulelor dintr-un mediu să se arate că densitatea de particule, inițial localizată în origine, se va răspîndi pe măsură ce timpul trece, ocupînd o regiune pentru care media pătratului razei regiunii este:

$$\langle |\vec{x}|^2 \rangle = 2d \cdot D \cdot |t|$$

unde d -este dimensionalitatea spațiului, iar D -este coeficientul de difuzie.

1.4 Considerăm ecuația tridimensională a difuziei:

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 p(\vec{r}, t) \quad (1)$$

cu condiția inițială (pentru cazul cu simetrie sferică):

$$p(\vec{r}, 0) = \frac{\delta(r - r_0)}{4\pi r_0^2} \quad r_0 > 0 \quad (2)$$

și cu condițiile de legătură:

$$p(\vec{r}, t) = 0 \quad \text{pentru} \quad |\vec{r}| = a \quad \lim_{r \rightarrow \infty} p(\vec{r}, t) = 0 \quad (3)$$

a) Arătați că pentru $r > a$:

$$p(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi r r_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \left[e^{-\frac{(r-r_0)^2}{4Dt}} - e^{-\frac{(r+r_0-2a)^2}{4Dt}} \right]$$

este o soluție a problemei (1-3).

b) Arătați că:

$$\dot{N}(t) = 4\pi a^2 D \cdot \frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial r} \Big|_{r=a}$$

este rata de particule expulzate la $r = a$.

c) Arătați că:

$$\dot{N}(t) = \frac{a}{r_0} \cdot \frac{r_0 - a}{t} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \cdot e^{-\frac{(r_0-a)^2}{4Dt}}$$

d) Arătați că numărul de particule expulzate este:

$$\int_0^\infty dt \cdot \dot{N}(t) = \frac{a}{r_0}$$

1.5 Considerăm o particulă care difuzează liber într-un interval unidimensional finit $L = [0, a]$. Condițiile la limită sînt următoarele:

$$p(x, t|x_0, 0)|_{x=0} = 0$$

$$\frac{\partial p(x, t|x_0, 0)}{\partial x} \Big|_{x=a} = 0$$

iar condiția inițială:

$$p(x, 0|x_0, 0) = \delta(x - x_0)$$

a) Găsiți valorile proprii și funcțiile proprii ale operatorului de difuzie și dați reprezentarea spectrală pentru funcția de distribuție $p(x, t|x_0, 0)$.

b) Calculați numărul de particule $N(t|x_0)$ și timpul de reacție, definit prin:

$$\tau(x_0) = \int_0^\infty dt \cdot N(t|x_0)$$

1.6 Calculați funcția Green difuzivă $G(\vec{x}, t)$ pentru un sistem d -dimensional.

1.7 Considerăm un sistem în care există neuniformități de densitate. Aceste neuniformități duc la apariția unui curent de particule. Curentul nu răspunde instantaneu la modificările de densitate, întârzierea în răspuns fiind descrisă de timpul de relaxare τ .

a) Determinați funcția Green difuzivă $G(\vec{q}, z)$ pentru acest caz, considerînd că ea verifică ecuația:

$$\frac{\partial^2 G(\vec{x}, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \cdot \frac{\partial G(\vec{x}, t)}{\partial t} - \frac{D}{\tau} \cdot \nabla^2 G(\vec{x}, t) = 0$$

cu condițiile:

$$G(\vec{x}, t = 0) = \delta(\vec{x})$$

$$\left. \frac{\partial G(\vec{x}, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0$$

b) Găsiți funcția de răspuns densitate $\chi(\vec{q}, z)$, precum și $\chi''(\vec{q}, \omega)$.

1.8 Difuzia pentru un sistem de particule care disociază (cantitatea de particule disociate în unitatea de timp, într-un punct, fiind proporțională cu densitatea) este descrisă de ecuația:

$$\frac{\partial n(\vec{x}, t)}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 n(\vec{x}, t) - \alpha \cdot n(\vec{x}, t) \quad t > 0$$

a) Găsiți funcția Green $G(\vec{x}, t)$ corespunzătoare acestui proces, dacă ea verifică condiția inițială:

$$G(\vec{x}, t = 0) = \delta(\vec{x})$$

b) Definind funcția de sursă, corespunzătoare acestui proces, ca fiind:

$$\overline{G}(\vec{x}) = \int_0^\infty dt \cdot G(\vec{x}, t)$$

arătați că pentru cazul bidimensional:

$$\overline{G}(\vec{x}) = \frac{1}{2\pi D} \cdot K_0(\gamma|\vec{x}|)$$

unde: $\gamma = \sqrt{\alpha/D}$, iar $K_0(y)$ este funcția Macdonald (funcția Bessel modificată).

c) Arătați că pentru distanțe mari ($|\vec{x}| \rightarrow \infty$), funcția de sursă are un comportament de tipul:

$$\overline{G}(\vec{x}) \sim \frac{1}{\sqrt{|\vec{x}|}} \cdot e^{-\gamma|\vec{x}|}$$

1.9 Susceptibilitatea dinamică a unui sistem bidimensional este:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi}{1 + \xi^2 q^2 - i\omega/\omega_{SF}}$$

Arătați că funcția Green corespunzătoare acestei susceptibilități este dată de:

$$G(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi\omega_{SF}\xi^2 t} \cdot \exp\left[-\frac{|\vec{x}|^2}{4\omega_{SF}\xi^2 t} - \omega_{SF}t\right] \quad t > 0$$

1.10 Considerăm un sistem descris de funcția Green:

$$G(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi\omega_{SF}\xi^2 t} \cdot \exp\left[-\frac{|\vec{x}|^2}{4\omega_{SF}\xi^2 t} - \omega_{SF}t\right] \quad t > 0$$

Determinați $\langle |\vec{x}|^2 \rangle$ și reprezentați dependența lui de timp. Găsiți de asemenea valoarea maximă pentru $\langle |\vec{x}|^2 \rangle$.

1.11 Pentru un sistem cu neuniformități de densitate, curentul de particule apare cu o întârziere τ .

a) Arătați că pentru $q < \frac{1}{2\sqrt{D}\tau}$ funcția Green difuzivă este dată de:

$$G(\vec{q}, t) = \frac{1}{2\alpha} \left[(1 + \alpha) \cdot \exp\left(-\frac{1 - \alpha}{2\tau}t\right) - (1 - \alpha) \cdot \exp\left(-\frac{1 + \alpha}{2\tau}t\right) \right]$$

unde:

$$\alpha = \sqrt{1 - 4Dq^2\tau}$$

b) Evaluați expresia funcției Green în domeniul lungimilor de undă mari, adică $G(\vec{q} \rightarrow 0, t)$ și arătați că:

$$G(\vec{q} \rightarrow 0, t)|_{\tau=0} = e^{-Dq^2t} \quad t > 0$$

c) Arătați deasemenea că:

$$G(\vec{q}, t)|_{\tau=0} = e^{-Dq^2t} \quad t > 0$$

pentru orice $q < \frac{1}{2\sqrt{D\tau}}$.

1.12 Folosind reprezentarea spectrală, arătați că:

$$\chi''_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \frac{1}{2\hbar} [S_{\phi_i\phi_j}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) - S_{\phi_j\phi_i}(\vec{x}', \vec{x}, -\omega)]$$

relație folosită pentru obținerea teoremei fluctuație-disipație. Regăsiți teorema fluctuație-disipație folosind reprezentarea spectrală.

1.13 Folosind reprezentarea spectrală pentru partea imaginară a funcției de răspuns arătați că pentru un oscilator armonic avem:

$$\chi''_{xx}(\omega) = \frac{\pi}{2m_0\omega_0} [\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0)]$$

unde m_0 este masa oscilatorului, iar ω_0 pulsația proprie.

1.14 Folosind reprezentarea spectrală, calculați, pentru un oscilator armonic de masă m_0 și pulsație ω_0 , expresia lui $\chi''_{xv}(\omega)$ și observați proprietățile de simetrie. Calculați deasemenea $\tilde{\chi}''_{xv}(t)$.

1.15 Folosind forma generală pentru partea imaginară a funcției de răspuns $\chi''_{xx}(\omega)$ arătați că:

$$\chi''_{xx}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta\hbar\omega_n}}{Z} \cdot |\langle n|x|m\rangle|^2 \left[\frac{1}{\omega_m - \omega_n - \omega} - \frac{1}{\omega_n - \omega_m - \omega} \right]$$

iar apoi calculați $\chi'_{xx}(\omega)$ pentru cazul unui oscilator armonic liniar de masă m_0 și pulsație ω_0 . Găsiți aici $\langle x^2 \rangle$.

1.16 Considerăm o particulă de densitate ρ într-un fluid de densitate ρ_0 și în câmpul gravitațional $\vec{g} = g \cdot \vec{k}$. Probabilitatea $P(\vec{r}, t)$ ca particula să se afle în poziția \vec{r} la momentul t satisface ecuația Smoluchowski:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 P + \vec{c} \cdot \nabla P \equiv -\nabla \cdot \vec{j}$$

unde D este coeficientul de difuzie, $\vec{c} = \vec{g}[1 - (\rho_0/\rho)]/\gamma$, $\rho_0 \leq \rho$ și $\vec{j} = -(D \cdot \nabla P + \vec{c} \cdot P)$ este curentul. Această ecuație corespunde problemei difuziei dirijate în care avem un drift mediu de-a lungul lui \vec{k} . Arătați că soluția acestei ecuații, pentru un sistem infinit extins și care verifică condiția inițială $P(\vec{r}, 0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ este:

$$P(\vec{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \cdot e^{-|\vec{r} - \vec{r}_0 + \vec{c}t|^2/(4Dt)} \quad t > 0$$

1.17 Considerăm un container în care avem un fluid de densitate ρ_0 și particule Browniene de densitate ρ . Containerul nu este infinit extins, fundul său coincidând cu planul $z = 0$. Prin pereții containerului nu există scurgere de fluid. Considerînd că $P(\vec{r}, t) = P(z, t)$ deci nedepinzînd de x și y , rezolvați ecuația difuziei pentru particula Browniană de densitate ρ , aflată inițial în poziția z_0 și în câmp gravitațional, determinînd $P(z, t)$ (care verifică ecuația Smoluchowski), cu următoarele condiții de legătură: $P(z, 0) = \delta(z - z_0)$ și $j_z = 0$ la $z = 0$. (Indicație: vezi A.N.Tihonov, A.A.Samarski, Ecuațiile fizicii matematice, Cap.III).

Capitolul II

TEORIA LANGEVIN

Teoria Langevin se introduce în legătură cu mișcarea haotică a unei particule Browniene. Acest tip de mișcare se datorează ciocnirilor cu moleculele fluidului prin care se mișcă particula. Aceste ciocniri permit schimbul de energie între fluidul aflat la temperatura T și particula Browniană, precum și stabilirea echilibrului termic. Aceasta înseamnă că media pătratului fiecărei componente a vitezei particulei, mediată pe un interval de timp suficient de lung, are valoarea T/m , prezisă de statistica Boltzmann. Această medie se menține datorită ciocnirilor succesive. Pentru a înțelege cum se atinge echilibrul, datorită forțelor aleatoare, să observăm difuzia unei particule în cazul unidimensional. Moleculele fluidului se ciocnesc cu particula care difuzează, în mod întâmplător, exercitând o forță a cărei medie în timp este forța vîscoasă $-\alpha v$. Putem deci considera forța exercitată asupra unei particule, de către fluid, ca fiind alcătuită din două componente: forța vîscoasă medie $-\alpha v$ și o forță aleatoare $\zeta(t)$ a cărei medie în timp este zero. Această forță aleatoare este bine aproximată printr-o succesiune de impulsuri avînd semne și valori aleatoare, după cum se vede în Fig.2.1.

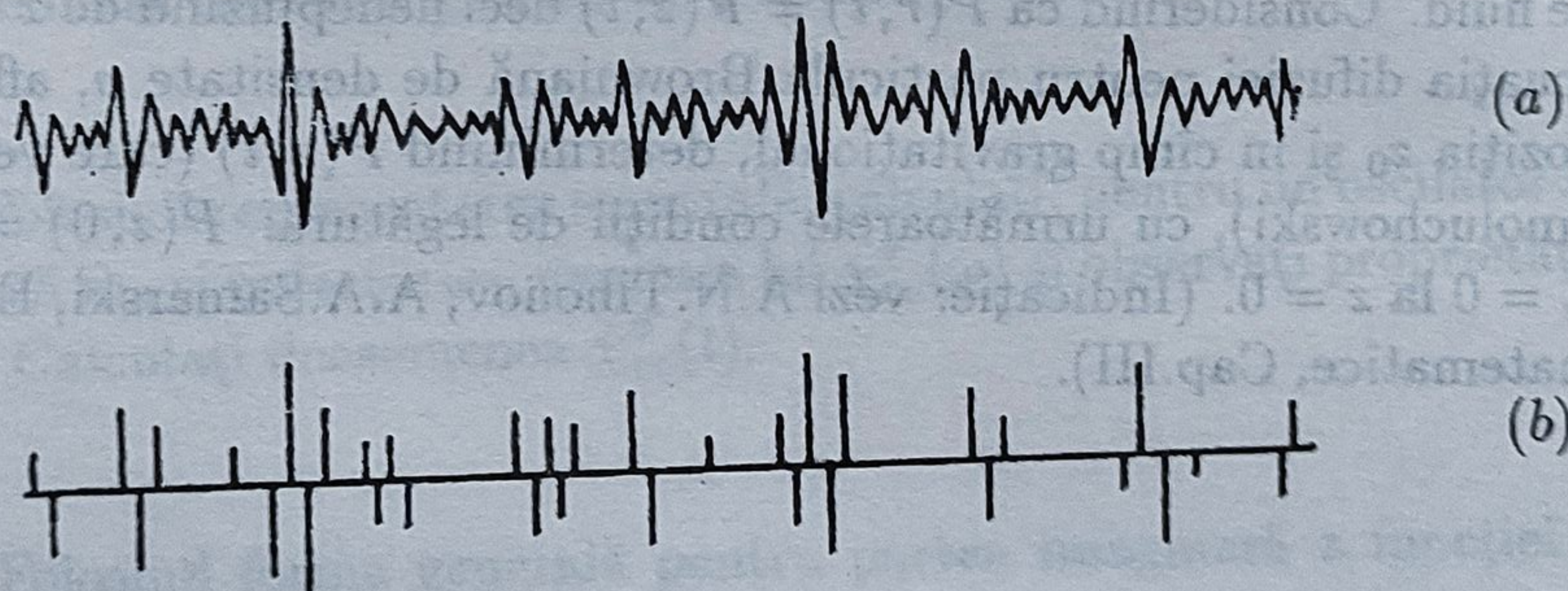


Fig.2.1 (a) Reprezentarea schematică a forței aleatoare $\zeta(t)$ ca funcție de timp. (b) $\zeta(t)$ aproximată printr-o succesiune de impulsuri aleatorii.

Aici, mai degrabă decît să considerăm medii în timp, vom considera medii peste ansamblul de forțe aleatoare posibile și vom reprezenta aceste medii prin $\langle \dots \rangle$, în același mod cum se reprezintă mediile pe un ansamblu de echilibru. Vom alege ansamblul de forțe în așa fel încît mediile peste el să fie identice cu mediile peste un ansamblu de echilibru. Astfel avem:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0 \quad (2.1)$$

Dacă fiecare puls este considerat drept un eveniment aleator independent, atunci distribuția de probabilitate pentru $\zeta(t)$ este independentă de $\zeta(t')$ pentru $t' \neq t$. Acesta implică:

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = A \cdot \delta(t - t') \quad (2.2)$$

A este o constantă care rămîne a fi determinată. În final, $\zeta(t)$ în aproximația pulsurilor independente, este suma unui număr mare de funcții independente. Atunci, teorema limitei centrale implică faptul că distribuția de probabilitate pentru $\zeta(t)$ este o Gaussiană a cărei lărgime este determinată de A :

$$P[\zeta(t)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi A}} e^{-\frac{1}{2A} \int dt \cdot \zeta^2(t)} \quad (2.3)$$

Forțele aleatoare $\zeta(t)$ conduc la un comportament haotic, sau de tip **zgomot**, al observabilelor și adesea sînt numite **surse de zgomot**, mai ales în cazul circuitelor electrice. Ecuațiile (2.1) și (2.3) necesită o caracterizare suficient de precisă a forței $\zeta(t)$, pentru a putea discuta echilibrul termic. Forma concretă a lui $\zeta(t)$ este determinată de statistica temporală a moleculelor fluidului. Astfel ne putem aștepta ca aproximația evenimentelor haotice independente să nu fie valabilă pentru diferențe de timp $t - t'$ mai mici decît un timp caracteristic de ciocnire al moleculelor de fluid, τ_c . Pentru mișcarea unei particule Browniene, timpul caracteristic γ^{-1} este mult mai mare decît τ_c , astfel încît aproximația ciocnirilor independente este foarte bună, pentru intervale de timp de interes. Spectrul lui $\zeta(t)$, sau transformata Fourier a lui $\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle$,

$$I(\omega) \equiv C_{\zeta\zeta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t - t') \cdot e^{i\omega(t-t')} \langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = A \quad (2.4)$$

este independentă de ω , în aproximația ciocnirilor independente. O sursă de zgomot cu un spectru independent de frecvență se numește sursă de **zgomot**

alb. Vom vedea în continuare cum, cunoașterea statisticii forțelor aleatoare ne permite să calculăm funcțiile de corelare. În absența forțelor exterioare, ecuația de mișcare pentru o particulă care difuzează este:

$$m\dot{v} + \alpha v = \zeta(t) \quad (2.5)$$

Soluția acestei ecuații pentru $v(t)$ are o parte omogenă determinată de condițiile inițiale și o parte neomogenă proporțională cu $\zeta(t)$. Deoarece partea omogenă, care depinde de condițiile inițiale, va descrește la zero într-un interval de timp de ordinul γ^{-1} , proprietățile lui $v(t)$ pentru intervale de timp mari vor fi determinate numai de partea neomogenă și vor fi independente de condițiile inițiale. Cu rețeta:

$$v(t) \rightarrow v(\omega) \quad \zeta(t) \rightarrow \zeta(\omega) \quad \frac{d}{dt} \rightarrow -i\omega$$

în spațiul Fourier, (2.5) devine:

$$-i\omega m v(\omega) + \alpha v(\omega) = \zeta(\omega)$$

deci:

$$v(\omega) = \frac{\zeta(\omega)}{-i\omega m + \alpha} \quad (2.6)$$

Folosind (2.6) și (1.7), putem calcula $C_{vv}(\omega)$ mediind produsul $v(\omega)v(-\omega)$ peste forțele aleatoare:

$$\langle v(\omega)v(\omega') \rangle = C_{vv}(\omega) \cdot 2\pi\delta(\omega + \omega') \quad (2.7)$$

Pe de altă parte:

$$\langle v(\omega)v(\omega') \rangle = \left\langle \frac{\zeta(\omega)}{-i\omega m + \alpha} \cdot \frac{\zeta(\omega')}{-i\omega' m + \alpha} \right\rangle = \frac{\langle \zeta(\omega)\zeta(\omega') \rangle}{(-i\omega m + \alpha)(-i\omega' m + \alpha)}$$

Dar:

$$\langle \zeta(\omega)\zeta(\omega') \rangle = C_{\zeta\zeta}(\omega) \cdot 2\pi\delta(\omega + \omega')$$

și:

$$\langle v(\omega)v(\omega') \rangle = \frac{C_{\zeta\zeta}(\omega)}{(-i\omega m + \alpha)(-i\omega' m + \alpha)} \cdot 2\pi\delta(\omega + \omega') \quad (2.8)$$

Comparînd (2.7) cu (2.8) avem:

$$C_{vv}(\omega) = \frac{C_{\zeta\zeta}(\omega)}{(-i\omega m + \alpha)(-i\omega' m + \alpha)}$$

Punînd aici $\omega' = -\omega$ (din cauza funcției delta) și $C_{\zeta\zeta}(\omega) = A$, obținem:

$$C_{vv}(\omega) = \frac{A}{\alpha^2 + m^2\omega^2} = \frac{A}{m^2(\omega^2 + \gamma^2)} \quad (2.9)$$

Constanta A este încă nedeterminată. Putem folosi ec.(2.9) pentru a calcula media pătratului vitezei ca funcție de A și apoi să determinăm A folosind condiția de echilibru termic:

$$\langle v^2 \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \cdot C_{vv}(\omega) = \frac{A}{2\pi m^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega^2 + \gamma^2} = \frac{A}{2m^2\gamma} = \frac{A}{2m\alpha} \quad (2.10)$$

La echilibru termic

$$\langle v^2 \rangle = T/m$$

deci:

$$\frac{A}{2m\alpha} = \frac{T}{m} \rightarrow A = 2\alpha T = 2\gamma m T \quad (2.11)$$

și:

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2\alpha T \cdot \delta(t - t') \quad (2.12)$$

Funcția de corelare $C_{vv}(\omega)$ determină $C_{vv}(t, t') = \langle v(t)v(t') \rangle$ dar la fel de bine și $\langle v^2 \rangle$. Neglijarea termenului omogen în soluția pentru $v(\omega)$ este valabilă numai pentru intervale de timp mari în comparație cu γ^{-1} . Transformata Fourier a lui $C_{vv}(\omega)$ dat de (2.9) duce la funcția:

$$\begin{aligned} C_{vv}(t - t') &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega(t-t')} C_{vv}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega(t-t')} \frac{A}{m^2(\omega^2 + \gamma^2)} = \\ &= \frac{A}{2\pi m^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega^2 + \gamma^2} \end{aligned}$$

Făcînd schimbarea de variabilă:

$$z = i\omega \rightarrow d\omega = -i \cdot dz$$

avem:

$$C_{vv}(t - t') = -\frac{iA}{2\pi m^2} \int_{-i\infty}^{i\infty} dz \frac{e^{-z(t-t')}}{\gamma^2 - z^2}$$

Polii sînt:

$$z_{1,2} = \pm \gamma$$

iar conturul de integrare (cînd $t - t' \rightarrow |t - t'|$) se închide prin semiplanul drept. Vom obține:

$$C_{vv}(t - t') = -\frac{iA}{2\pi m^2} (-2\pi i) \text{Rez}(f(z); \gamma) = \frac{T}{m} \cdot e^{-\gamma|t-t'|} \quad (2.13)$$

Această ecuație arată că $v(t)$ și $v(0)$ devin necorelate pentru intervale de timp mai mari decît γ^{-1} și că $\langle v(t)v(0) \rangle$ este de ordinul mediei termice T/m pentru intervale de timp mai mici decît γ^{-1} , după cum se vede în Fig.2.2.

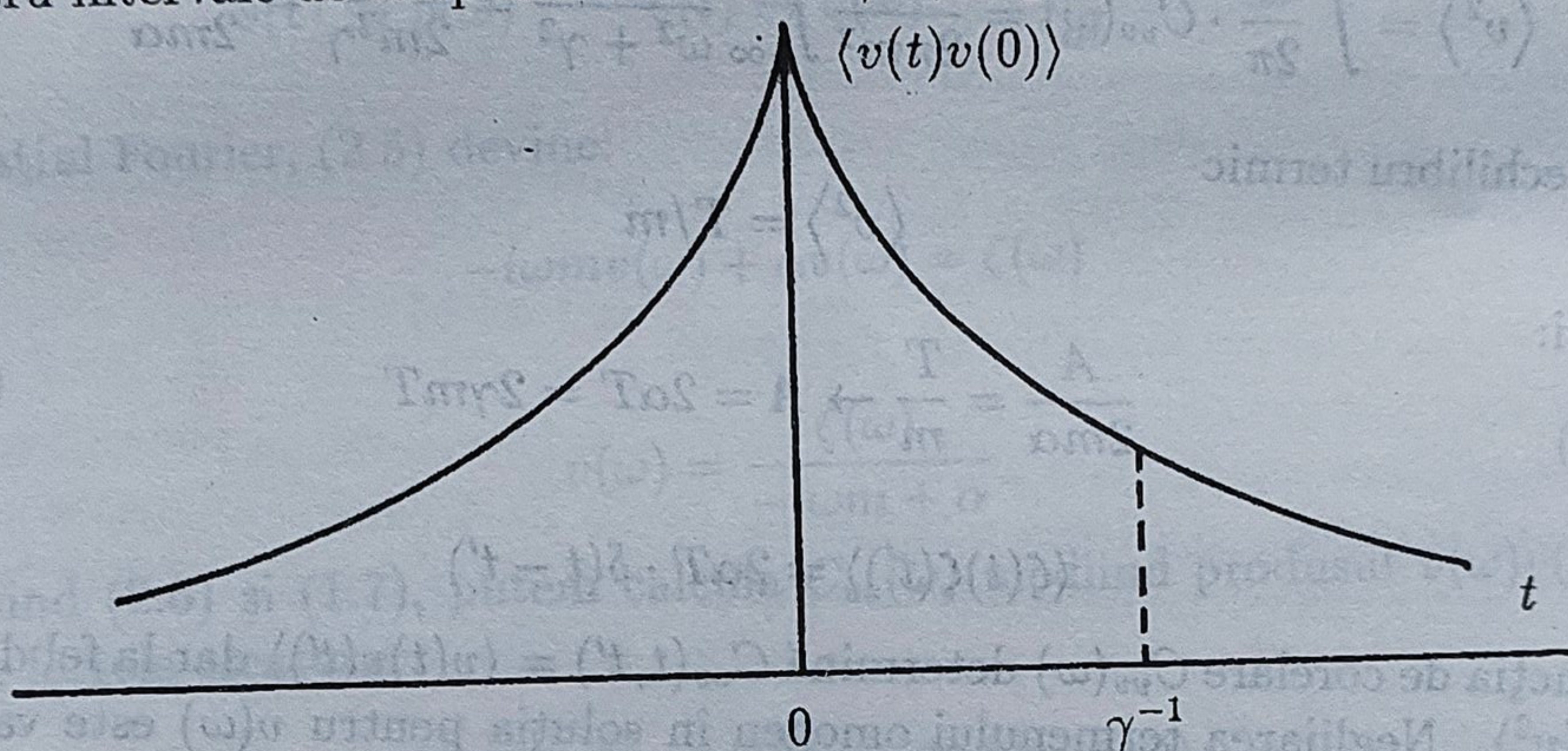


Fig.2.2 Funcția de corelație a vitezelor $\langle v(t)v(0) \rangle$ care prezintă o atenuare spre zero de tip exponențial.

Transformata Fourier $x(\omega)$ pentru poziție este (folosind rețeta $d/dt \rightarrow -i\omega$):

$$v(\omega) = -i\omega x(\omega) \rightarrow x(\omega) = \frac{v(\omega)}{-i\omega}$$

Atunci putem determina funcția de corelare în poziții:

$$\langle x(\omega)x(\omega') \rangle = C_{xx}(\omega) \cdot 2\pi\delta(\omega + \omega') \quad (2.14)$$

Cum:

$$\begin{aligned}\langle x(\omega)x(\omega') \rangle &= \left\langle \frac{v(\omega)}{-i\omega} \cdot \frac{v(\omega')}{-i\omega'} \right\rangle = -\frac{1}{\omega\omega'} \langle v(\omega)v(\omega') \rangle = \\ &= -\frac{1}{\omega\omega'} C_{vv}(\omega) \cdot 2\pi\delta(\omega + \omega')\end{aligned}\quad (2.15)$$

avem:

$$C_{xx}(\omega) = -\frac{1}{\omega\omega'} C_{vv}(\omega)$$

cu $\omega' \rightarrow -\omega$ și $C_{vv}(\omega)$ din (2.9). Deci:

$$C_{xx}(\omega) = \frac{1}{\omega^2} \cdot \frac{A}{m^2(\omega^2 + \gamma^2)} = \frac{2\gamma T}{m\omega^2(\omega^2 + \gamma^2)} \quad (2.16)$$

Integrala peste ω din $C_{xx}(\omega)$ dă media pătratului deplasării $\langle x^2 \rangle$. Această integrală este divergentă deoarece conține un factor suplimentar ω^2 în numitorul lui $C_{xx}(\omega)$, astfel încât concluzionăm că $\langle x^2 \rangle$ este infinit. Media

$$\langle [x(t) - x(t')]^2 \rangle \equiv \langle [\Delta x(t - t')]^2 \rangle$$

este însă finită. Pentru a vedea cât este acest rezultat vom scrie:

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} x(\omega) \quad x(t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot e^{-i\omega' t'} x(\omega')$$

și:

$$\begin{aligned}&\left\langle \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} x(\omega) - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot e^{-i\omega' t'} x(\omega') \right]^2 \right\rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} \cdot e^{-i(\omega + \tilde{\omega})t} \langle x(\omega)x(\tilde{\omega}) \rangle - \\ &- 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t'} \langle x(\omega)x(\omega') \rangle + \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot \frac{d\tilde{\omega}'}{2\pi} \cdot e^{-i(\omega' + \tilde{\omega}')t'} \langle x(\omega')x(\tilde{\omega}') \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} \cdot e^{-i(\omega + \tilde{\omega})t} C_{xx}(\omega) \cdot 2\pi\delta(\omega + \tilde{\omega}) - \\ &- 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t'} C_{xx}(\omega) \cdot 2\pi\delta(\omega + \omega') +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot \frac{d\tilde{\omega}'}{2\pi} \cdot e^{-i(\omega' + \tilde{\omega}')t'} C_{xx}(\omega') \cdot 2\pi\delta(\omega' + \tilde{\omega}') = \\
& = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} C_{xx}(\omega) - 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} C_{xx}(\omega) \cdot e^{-i\omega t} e^{i\omega t'} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} C_{xx}(\omega')
\end{aligned}$$

Rebotezînd în ultimul termen $\omega' \rightarrow \omega$, expresia de mai sus devine:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot 2C_{xx}(\omega) [1 - e^{-i\omega t} e^{i\omega t'}]$$

iar pentru $t' = 0$, obținem că:

$$\langle [\Delta x(t)]^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot 2C_{xx}(\omega) [1 - e^{-i\omega t}] \quad (2.17)$$

Scriem (2.16) sub forma:

$$C_{xx}(\omega) = \frac{2T}{m\gamma} \left(\frac{1}{\omega^2} - \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} \right)$$

și îl înlocuim în (2.17):

$$\begin{aligned}
\langle [\Delta x(t)]^2 \rangle &= \frac{4T}{2\pi m\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(\frac{1}{\omega^2} - \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} \right) (1 - e^{-i\omega t}) = \\
&= \frac{4T}{2\pi m\gamma} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{\omega^2} (1 - e^{-i\omega t}) - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1 - e^{-i\omega t}}{\omega^2 + \gamma^2} \right] = \\
&= \frac{4T}{2\pi m\gamma} [I' - I] \quad (2.18)
\end{aligned}$$

unde I' și I sînt cele două integrale. Evaluăm I făcînd schimbarea de variabilă $z = i\omega$. Atunci:

$$I = -i \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{dz}{\gamma^2 - z^2} (1 - e^{-z|t|})$$

cu polii: $z = \pm\gamma$, iar conturul de integrare fiind închis prin semiplanul drept. Atunci vom obține:

$$I = \frac{\pi}{\gamma} (1 - e^{-\gamma|t|}) \quad (2.19)$$

I' se obține din I luînd limita $\gamma \rightarrow 0$:

$$I' = \lim_{\gamma \rightarrow 0} I = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\pi}{\gamma} (1 - e^{-\gamma|t|}) = \pi|t| \quad (2.20)$$

Inlocuind (2.19) și (2.20) în (2.18) avem:

$$\langle [\Delta x(t)]^2 \rangle = 2D \left(|t| - \frac{1 - e^{-\gamma|t|}}{\gamma} \right) \quad (2.21)$$

unde am folosit relația lui Einstein pentru coeficientul de difuzie $D = T/m\gamma$. Pentru intervale de timp $t \gg \gamma^{-1}$, ecuația (2.21) se reduce la:

$$\langle [\Delta x(t)]^2 \rangle = 2D \cdot |t| \quad (2.22)$$

adică tocmai la rezultatul (1.71) prezis de ecuația difuziei. Pentru intervale de timp scurte:

$$\begin{aligned} \langle [\Delta x(t)]^2 \rangle &\simeq 2D \left(|t| - \frac{1 - (1 - \gamma|t| + \gamma^2 t^2/2 - \dots)}{\gamma} \right) = \\ &= D\gamma t^2 = \frac{T}{m} \cdot t^2 = \langle v^2 \rangle t^2 \end{aligned} \quad (2.23)$$

relație care ne spune că în această limită particula Browniană se mișcă **balistic**.

În analiza de mai sus am argumentat că putem neglija condițiile inițiale dacă sîntem interesați de limita intervalelor de timp mari și de echilibrul termic. Condițiile inițiale sînt adesea de interes și pot fi luate în considerare la fel de simplu ca și limita intervalelor de timp mari. Soluția ecuației (2.5) pentru $v(t)$, cu condiția inițială $v(t=0) = v_0$, este:

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + \int_0^t dt_1 e^{-\gamma(t-t_1)} \zeta(t_1)/m \quad (2.24)$$

Atunci viteza medie este:

$$\langle v(t) \rangle = v_0 e^{-\gamma t} \quad (2.25)$$

Funcția de corelație a vitezelor este:

$$\begin{aligned} \langle v(t)v(t') \rangle &= v_0^2 e^{-\gamma(t+t')} + \int_0^t dt_1 \int_0^{t'} dt_2 e^{-\gamma(t-t_1)-\gamma(t'-t_2)} \frac{2\gamma T}{m} \delta(t_1 - t_2) = \\ &= \left(v_0^2 - \frac{T}{m} \right) e^{-\gamma(t+t')} + \frac{T}{m} e^{-\gamma|t-t'|} \end{aligned} \quad (2.26)$$

iar varianța vitezei:

$$\Delta_v(t) = \langle [v(t) - \langle v(t) \rangle]^2 \rangle = \frac{T}{m} (1 - e^{-2\gamma|t|}) \quad (2.27)$$

unde am folosit ec.(2.2) pentru $\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle$ cu $A = 2m\gamma T$. Aceste ecuații arată că funcția de corelație a vitezelor tinde către rezultatul de la echilibru termic (2.13), pentru timpi t și (sau) t' mult mai mari decât timpul de atenuare γ^{-1} , indiferent de valoarea vitezei inițiale v_0 .

Variabila deplasare $x(t)$ poate fi obținută din viteză, prin integrare:

$$x(t) = x_0 + \int_0^t v(t_1) dt_1 \quad (2.28)$$

unde: $x(t=0) = x_0$. De aici și cu ecuația (2.25) putem calcula deplasarea medie ca funcție de timp:

$$\langle x(t) \rangle = x_0 + \frac{v_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}), \quad t > 0 \quad (2.29)$$

În mod similar putem calcula corelațiile în poziții, pentru momente de timp diferite, $t > 0$ și $t' > 0$:

$$\langle [x(t) - x(t')]^2 \rangle = \left\langle \left(\int_{t'}^t v(t_1) dt_1 \right)^2 \right\rangle \quad (2.30)$$

Folosind ec.(2.26) pentru funcția de corelație a vitezelor, obținem:

$$\begin{aligned} \langle [x(t) - x(t')]^2 \rangle &= \left(v_0^2 - \frac{T}{m} \right) \frac{1}{\gamma^2} (e^{-\gamma t'} - e^{-\gamma t})^2 + \\ &+ \frac{2T}{\gamma m} \left[|t - t'| - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma|t-t'|}) \right] \end{aligned} \quad (2.31)$$

Dacă atât t cât și t' sînt mult mai mari decât γ^{-1} , ecuația (2.31) se reduce la ec.(2.21), fiind independentă de v_0 . Dacă, pe de altă parte, atât t cât și t' sînt mult mai mici decât γ^{-1} ,

$$\langle [x(t) - x(t')]^2 \rangle = v_0^2 (t - t')^2$$

iar particula Browniană se mișcă balistic, cu viteza inițială precizată. Media $\langle [x(t) - x_0]^2 \rangle$ se obține din (2.31) punând $t' = 0$, astfel încît $x(t') = x_0$. În final, calculăm varianța poziției:

$$\begin{aligned}\Delta_x(t) &= \langle [x(t) - \langle x(t) \rangle]^2 \rangle = \\ &= \frac{2T}{\gamma m} \left[t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) - \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-\gamma t})^2 \right] \quad (2.32)\end{aligned}$$

De notat că $\Delta_x(t)$ nu este egal cu $\langle [\Delta x(t)]^2 \rangle$ din ec.(2.21), deoarece $\Delta_x(t)$ reține în mod explicit faptul că mișcarea inițială a fost balistică mai degrabă decît difuzivă.

Probleme

2.1 Considerăm un oscilator de masă m care vibrează într-un mediu vîscos și este acționat de forța aleatoare $\zeta(t)$.

a) Calculați funcția de răspuns $\chi(\omega)$ dată de ecuația:

$$x(\omega) = \chi(\omega) \cdot \zeta(\omega)$$

b) Calculați funcția de corelație $C_{xx}(\omega)$ și arătați că:

$$C_{xx}(\omega) = 2m\gamma T \cdot |\chi(\omega)|^2$$

c) Calculați $\langle x^2 \rangle$ integrînd $C_{xx}(\omega)$ peste frecvențe.

d) Stabiliți legătura între $C_{xx}(\omega)$ și $\chi''(\omega)$.

2.2 a) Calculați funcția de corelație $C_{xv}(\omega)$ și partea disipativă a funcției de răspuns corespunzătoare $\chi''_{xv}(\omega)$ pentru mișcarea unei particule difuzive sub acțiunea forței aleatoare $\zeta(t)$.

b) Calculați aceleași mărimi pentru cazul unui oscilator de masă m care vibrează într-un mediu vîscos și este acționat de forța aleatoare $\zeta(t)$.

2.3 Pentru un comportament de tip difuziv să se calculeze funcția de corelație densitate $S_{nn}(\vec{q}, t)$, $t > 0$. Să se determine deasemenea $S_{nn}(\vec{x}, t)$ pentru un sistem d -dimensional, dacă $\chi(\vec{q}) = \chi_0 = \text{const}$.

2.4 Considerăm un circuit RC , la momentul $t = 0$ tensiunea pe condensator fiind U_0 . Rezistența R se află în contact cu o baie termică de temperatură T . Fluctuațiile termice din rezistor sînt descrise de o funcție cu variații rapide și neregulate $\zeta(t)$, care se bucură de proprietățile:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0 \quad \langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = A \cdot \delta(t - t')$$

Arătați că valoarea medie a pătratului tensiunii este dată de:

$$\langle U^2 \rangle_t = \frac{k_B T}{C} + \left(U_0^2 - \frac{k_B T}{C} \right) \cdot e^{-2t/RC}$$

Capitolul III

CONDUCTIBILITATEA ELECTRICĂ

Vom analiza, pentru început, dinamica purtătorilor de sarcină electrică într-un conductor, sub acțiunea unui câmp electric \vec{E} . Considerînd că sarcinile electrice în mișcare întîmpină din partea mediului o forță de rezistență proporțională cu viteza, ecuația de mișcare este:

$$m \frac{dv}{dt} = qE - \alpha v \quad (3.1)$$

Integrînd această ecuație obținem:

$$-\frac{qE}{\alpha} \ln \left(1 - \frac{\alpha v}{qE} \right) = \frac{qEt}{m} + C \quad (3.2)$$

cu condiția inițială: $t = 0 \rightarrow v = 0$, iar de aici, împreună cu (3.2), rezultă $C = 0$. Atunci:

$$v(t) = \frac{qE}{\alpha} \left(1 - e^{-\frac{\alpha t}{m}} \right) \quad (3.3)$$

Introducînd timpul de relaxare τ prin:

$$\tau = \frac{m}{\alpha}$$

avem:

$$v(t) = \frac{q\tau E}{m} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right) \quad (3.4)$$

Densitatea de curenți j , determinată de mișcarea sarcinilor electrice este:

$$j(t) = nqv(t)$$

sau:

$$j(t) = \frac{nq^2\tau}{m} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right) E$$

După un timp suficient de lung de la cuplarea sursei, $t \gg \tau$, se atinge regimul permanent, cînd sarcinile se mișcă cu o viteză constantă $q\tau E/m$ sau μE , unde $\mu = q\tau/m$ este mobilitatea. În această situație, densitatea de curent este:

$$j = \frac{nq^2\tau}{m} \cdot E = \sigma \cdot E \quad (3.5)$$

unde:

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m} \quad (3.6)$$

este conductivitatea electrică.

Vedem, în continuare, cum se modifică expresia conductivității electrice în cazul în care cîmpul electric aplicat are forma:

$$E(t) = E_0 e^{-i\omega t} \quad (3.7)$$

În acest caz ecuația (3.1) se scrie:

$$m \frac{dv(t)}{dt} + \frac{m}{\tau} v(t) = qE(t)$$

iar transformata Fourier corespunzătoare ei este:

$$-i\omega m v(\omega) + \frac{m}{\tau} v(\omega) = qE(\omega) \quad (3.8)$$

În obținerea ec.(3.8) am folosit direct rețeta:

$$v(t) \rightarrow v(\omega)$$

$$E(t) \rightarrow E(\omega)$$

$$\frac{d}{dt} \rightarrow -i\omega$$

Din ecuația (3.8) obținem:

$$v(\omega) = \frac{q\tau}{m} \cdot \frac{E(\omega)}{1 - i\omega\tau} \quad (3.9)$$

Densitatea de curent $j(\omega)$ este atunci:

$$j(\omega) = nqv(\omega) = \frac{nq^2\tau}{m} \cdot \frac{1}{1 - i\omega\tau} \cdot E(\omega) \quad (3.10)$$

Considerînd $j(\omega)$ răspunsul sistemului la aplicarea cîmpului electric $E(\omega)$, vom introduce funcția de răspuns conductivitate $\sigma(\omega)$ prin:

$$j(\omega) = \sigma(\omega) \cdot E(\omega) \quad (3.11)$$

Comparînd (3.10) cu (3.11) obținem:

$$\sigma(\omega) = \frac{nq^2\tau}{m} \cdot \frac{1}{1 - i\omega\tau} = \frac{\sigma}{1 - i\omega\tau} \quad (3.12)$$

(3.12) este conductivitatea dinamică. Scriind (3.12) sub forma:

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma}{1 + (\omega\tau)^2} + i \frac{\sigma\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}$$

obținem părțile reală și imaginară:

$$\sigma'(\omega) = \frac{\sigma}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (3.13)$$

$$\sigma''(\omega) = \frac{\sigma\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (3.14)$$

Rezistivitatea dinamică se definește prin:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\sigma(\omega)} \quad (3.15)$$

deci:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\sigma} - i \frac{\omega\tau}{\sigma}$$

și de aici:

$$\rho' = \frac{1}{\sigma} \quad (3.16)$$

$$\rho''(\omega) = -\frac{\omega\tau}{\sigma} \quad (3.17)$$

Introducînd frecvența plasmei electronice prin:

$$\omega_p^2 = \frac{nq^2}{\epsilon_0 m} \quad (3.18)$$

relațiile (3.16) și (3.17) devin:

$$\rho' = \frac{1}{\epsilon_0 \omega_p^2} \cdot \frac{1}{\tau}$$

$$\rho''(\omega) = -\frac{\omega}{\epsilon_0 \omega_p^2}$$

Intr-un metal obișnuit $n \sim 10^{29} m^{-3}$, iar frecvența plasmei este de ordinul $\omega_p \sim 10^{16} Hz$.

Expresiile pentru conductivitate obținute mai sus sînt rezultatul folosirii unei ecuații fenomenologice. Vedem în continuare expresia conductivității electrice în cazul unui metal care se află într-un câmp electric omogen \vec{E} care nu depinde de timp, folosind ecuația de transport a lui Boltzmann. Această ecuație, sub forma generală, este:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = \sum_{k', \sigma} \left\{ W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}', t) [1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)] - \right. \\ \left. - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{r}, \vec{k}, t) [1 - f(\vec{r}, \vec{k}', t)] \right\} \quad (3.19)$$

unde: f -este funcția de distribuție de neechilibru, \vec{F} - forța care acționează asupra particulelor, iar W -probabilități de tranziție. În cazul nostru, forța care acționează asupra unui electron este:

$$\vec{F} = q\vec{E} = -e\vec{E}$$

Dacă \vec{E} nu depinde de timp, curgerea electronilor prin metal este staționară, adică:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

În plus, sistemul este considerat omogen, deci:

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = 0$$

Atunci, (3.19) devine:

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \sum_{k', \sigma} \left\{ f(\vec{k}') [1 - f(\vec{k})] W(\vec{k}', \vec{k}) - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}) [1 - f(\vec{k}')] \right\}$$

În cazul ciocnirilor elastice:

$$W(\vec{k}', \vec{k}) = W(\vec{k}, \vec{k}')$$

și:

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \sum_{k', \sigma} W(\vec{k}, \vec{k}') [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] \quad (3.20)$$

În (3.20) considerăm că funcția de distribuție se abate puțin de la valoarea de echilibru, astfel încât termenii pătratici (în E) sînt neglijabili. Acest lucru este valabil atît timp cît cîmpul electric aplicat este suficient de mic. Funcția de distribuție va fi scrisă astfel:

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) + f_1(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{\chi}(\epsilon_k) \vec{k} \quad (3.21)$$

unde $f_0(\vec{k})$ -este funcția de distribuție de echilibru, iar $\vec{\chi}(\epsilon_k)$ este deocamdată o funcție necunoscută. Ea va fi determinată din ecuația lui Boltzmann. Înlocuim (3.21) în (3.20), iar în membrul stîng al ecuației (3.20) înlocuim $f(\vec{k})$ cu $f_0(\vec{k})$. Această ultimă înlocuire este echivalentă cu aproximația liniară în \vec{E} . Atunci obținem:

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \frac{\partial f_0}{\partial \vec{k}} = \sum_{k', \sigma} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[f_0(\vec{k}') - \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_{k'}} \vec{\chi}(\epsilon_{k'}) \vec{k}' - f_0(\vec{k}) + \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{\chi}(\epsilon_k) \vec{k} \right]$$

În cazul ciocnirilor elastice:

$$\epsilon_{k'} = \epsilon_k \rightarrow f_0(\vec{k}') = f_0(\vec{k})$$

și:

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \cdot \frac{\partial \epsilon_k}{\partial \vec{k}} = 2 \sum_{k'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{\chi}(\epsilon_k) \vec{k} - \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{\chi}(\epsilon_k) \vec{k}' \right]$$

sau:

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \cdot \frac{\partial \epsilon_k}{\partial \vec{k}} = 2 \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{\chi}(\epsilon_k) \vec{k} \sum_{k'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{k'_x}{k_x} \right] \quad (3.22)$$

unde k_x -este proiecția lui \vec{k} pe direcția lui $\vec{\chi}$, iar factorul 2 provine de la sumarea pe stările de spin.

Din (3.21) putem scrie:

$$\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{\chi}(\epsilon_k) \vec{k} = -f_1(\vec{k})$$

cu care (3.22) devine:

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \cdot \frac{\partial \epsilon_k}{\partial \vec{k}} = -2f_1(\vec{k}) \sum_{k'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{k'_x}{k_x} \right] = -f_1(\vec{k}) \cdot \frac{1}{\tau(\vec{k})} \quad (3.23)$$

unde:

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = 2 \sum_{k'} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{k'_x}{k_x} \right] \quad (3.24)$$

$\tau(\vec{k})$ introdus prin relația (3.24) se numește timp de relaxare și ne arată după cât timp funcția de distribuție a unui sistem în neechilibru, ajunge la valoarea funcției de distribuție de echilibru. Din (3.23) corecția $f_1(\vec{k})$ este:

$$f_1(\vec{k}) = \frac{e\tau(\vec{k})}{\hbar} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \cdot \frac{\partial \epsilon_k}{\partial \vec{k}} \cdot \vec{E} \sim \vec{E} \quad (3.25)$$

Pentru particule libere, (3.25) se rescrie astfel:

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \frac{\partial \epsilon_k}{\partial \vec{k}} = \frac{\hbar^2}{m} \cdot \vec{k} = \hbar \vec{v}$$

$$f_1(\vec{k}) = e\tau(\vec{k}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{v} \cdot \vec{E} \quad (3.26)$$

Densitatea de curent electric este dată de:

$$\vec{j} = -\frac{e}{V} \sum_{k,\sigma} \vec{v} f(\vec{k}) \quad (3.27)$$

sau:

$$\vec{j} = -\frac{e}{V} \sum_{k,\sigma} \vec{v} f_0(\vec{k}) - \frac{e}{V} \sum_{k,\sigma} \vec{v} f_1(\vec{k})$$

Primul termen din expresia de mai sus este zero datorită imparității, astfel încît:

$$\vec{j} = -\frac{2e}{V} \sum_k \vec{v} \cdot e\tau(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{v} \cdot \vec{E}$$

Produsul scalar $\vec{v} \cdot \vec{E}$ va fi scris:

$$\vec{v} \cdot \vec{E} = \sum_{\gamma} v_{\gamma} E_{\gamma} \quad \gamma = x, y, z$$

și vom trece de la sumă la integrală folosind rețeta:

$$\sum_k (...) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \cdot (...)$$

Vom obține:

$$\vec{j} = -\frac{2e^2}{V} \cdot \frac{V}{2^3\pi^3} \int d\vec{k} \cdot \tau(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \vec{v} \sum_{\gamma} v_{\gamma} E_{\gamma}$$

iar pe componente j_{α} ($\alpha = x, y, z$):

$$j_{\alpha} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int d\vec{k} \cdot \tau(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} v_{\alpha} \sum_{\gamma} v_{\gamma} E_{\gamma} = \sum_{\gamma} \sigma_{\alpha\gamma} E_{\gamma} \quad (3.28)$$

(3.28) reprezintă legea lui Ohm (sub formă locală), iar $\sigma_{\alpha\gamma}$ este tensorul conductivității, dat de:

$$\sigma_{\alpha\gamma} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int d\vec{k} \cdot \tau(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} v_{\alpha} v_{\gamma} \quad (3.29)$$

Adesea $\tau(\vec{k}) \rightarrow \tau(\epsilon_k)$ -depinde numai de energie. În acest caz tensorul conductivității este diagonal:

$$\sigma_{\alpha\gamma} = \sigma \cdot \delta_{\alpha\gamma}$$

Vom calcula σ , considerînd cîmpul electric aplicat după direcția Oz ($\vec{E} \parallel Oz$).

În acest caz:

$$v_z v_z = \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 k_z k_z = \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 k^2 \cos^2 \theta$$

și:

$$\sigma_{zz} \equiv \sigma = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int_0^{\pi} d\theta \cdot \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dk \cdot k^2 \tau(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 k^2 \cos^2 \theta$$

sau:

$$\sigma = -\frac{e^2}{3\pi^3} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \pi \int_0^{\infty} dk \cdot k^4 \tau(\epsilon_k) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}$$

unde am folosit:

$$\int_0^\pi d\theta \cdot \cos^2 \theta \cdot \sin \theta = \frac{2}{3}$$

Vom trece la integrala peste energii folosind:

$$k = \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar}$$

și vom obține:

$$\sigma = -\frac{2e^2}{3\pi^2\hbar^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_0^\infty d\epsilon \cdot \epsilon^{3/2} \tau(\epsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \quad (3.30)$$

Aici vom considera că $\tau(\epsilon)$ are următoarea dependență energetică:

$$\tau(\epsilon) = A \cdot \epsilon^p \quad (3.31)$$

cu care (3.30) devine:

$$\sigma = -\frac{2e^2}{3\pi^2\hbar^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} A \int_0^\infty d\epsilon \cdot \epsilon^{p+3/2} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \quad (3.32)$$

Evaluăm integrala din (3.32) ținând seama că $\partial f_0 / \partial \epsilon$ are un maxim pronunțat în jurul energiei $\epsilon = \mu$, astfel încât, dezvoltînd în serie $\epsilon^{p+3/2}$ după puterile lui $\epsilon - \mu$, obținem:

$$\begin{aligned} \epsilon^{p+3/2} = & \mu^{p+3/2} + \frac{1}{1!} \left(p + \frac{3}{2}\right) \mu^{p+1/2} (\epsilon - \mu) + \frac{1}{2!} \left(p + \frac{3}{2}\right) \left(p + \frac{1}{2}\right) \mu^{p-1/2} (\epsilon - \mu)^2 \\ & + \frac{1}{3!} \left(p + \frac{3}{2}\right) \left(p + \frac{1}{2}\right) \left(p - \frac{1}{2}\right) \mu^{p-3/2} (\epsilon - \mu)^3 + \dots \end{aligned} \quad (3.33)$$

Ca urmare a acestei dezvoltări vom avea de evaluat integrale de forma:

$$I_n = \int_0^\infty d\epsilon (\epsilon - \mu)^n \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}$$

cu:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} \rightarrow \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -\frac{\beta e^{\beta(\epsilon - \mu)}}{[e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1]^2}$$

deci:

$$I_n = -\int_0^\infty d\epsilon (\epsilon - \mu)^n \frac{\beta e^{\beta(\epsilon - \mu)}}{[e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1]^2}$$

Făcînd schimbarea de variabilă $x = \beta(\epsilon - \mu)$ vom avea:

$$I_n = -\frac{1}{\beta^n} \int_{-\mu\beta}^{\infty} dx \frac{x^n e^x}{(1 + e^x)^2}$$

Limita inferioară de integrare $-\mu\beta$ are ordinul de mărime:

$$-\mu\beta = -\frac{\mu}{k_B T} \sim -\frac{10^4}{10^2} \sim -10^2$$

și deoarece integrandul este o funcție rapid descrescătoare, putem înlocui limita inferioară de integrare prin $-\infty$:

$$I_n = -(k_B T)^n \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^n e^x}{(1 + e^x)^2} = -(k_B T)^n 2n! (1 - 2^{-n+1}) \zeta(n)$$

pentru n -par. I_n este nenulă numai pentru n -par, și:

$$\zeta(n) = \sum_{l=1}^{\infty} l^{-n}$$

Ținînd seama că:

$$\int_0^{\infty} d\epsilon \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -1$$

și:

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$$

obținem în final:

$$\sigma = \frac{2e^2}{3\pi^2 \hbar^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} A \mu^{p+3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \left(p + \frac{3}{2} \right) \left(p + \frac{1}{2} \right) \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right] \quad (3.34)$$

(3.34) este formula căutată, pentru conductivitatea electrică. Potențialul chimic din (3.34) se elimină cu ajutorul ecuației pentru numărul de particule.

Probleme

Capitolul IV

DIFUZIA CUANTICĂ. TEORIA LOCALIZĂRII

Teoria împrăștiilor. Matricea "t"

Funcția Green, într-un mediu fără centrii de împrăștiere, pentru cazul unidimensional, se definește prin relația ($\hbar^2/2m = 1$):

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k^2\right) G(x, x') = \delta(x - x') \quad (4.1)$$

$G(x, x')$ se determină scriind în prealabil transformata Fourier corespunzătoare ecuației (4.1). Aceasta se face folosind rețetele:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow -p^2 \quad \delta(x - x') \rightarrow 1 \quad G(x, x') \rightarrow G(p)$$

și obținem:

$$(p^2 - k^2)G(p) = 1 \quad (4.2)$$

de unde:

$$G(p) = \frac{1}{p^2 - k^2} \quad (4.3)$$

Folosind (4.3) determinăm $G(x, x')$ calculînd:

$$G(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \cdot \frac{e^{ip(x-x')}}{p^2 - k^2} \quad (4.4)$$

Aici vom scrie:

$$\frac{1}{p^2 - k^2} = \frac{1}{(p - k)(p + k)} \rightarrow \frac{1}{(p - k - i\eta)(p + k + i\eta)} \quad \eta \rightarrow 0$$

deci:

$$G(x, x') = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \frac{e^{ip(x-x')}}{(p - k - i\eta)(p + k + i\eta)}$$

3.1 Arătați că expresia conductivității metalice:

$$\sigma = \frac{2e^2}{3\pi^2\hbar^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} A\mu^{p+\frac{3}{2}} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \left(p + \frac{3}{2}\right) \left(p + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 + \dots \right]$$

se reduce la:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau(\epsilon_F)}{m}$$

în limita $T = 0^0 K$.

3.2 Pornind de la formula generală a conductivității electrice:

$$\sigma = \frac{2}{3} \cdot \frac{ne^2}{m} \cdot \frac{\int_0^\infty \epsilon^{3/2} \tau(\epsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}\right) \cdot d\epsilon}{\int_0^\infty \epsilon^{1/2} f_0 \cdot d\epsilon}$$

unde f_0 este funcția de distribuție, și considerînd $\tau(\epsilon) = A\epsilon^p$, calculați conductivitatea electrică pentru un sistem în care concentrația de electroni este mică.

3.3 Asupra unui sistem electronic în care există fluctuații de densitate acționează un câmp electric $\vec{E}(\vec{x}, t)$. Considerînd mișcarea electronilor în regim hidrodinamic, calculați funcția de răspuns conductivitate $\sigma(\vec{q}, \omega)$.

3.4 Considerînd un sistem bidimensional dezordonat, stabiliți legătura între conductivitatea dinamică $\sigma(\vec{q}, \omega)$ și funcția de răspuns $\chi(\vec{q}, \omega)$ pentru cazul unui regim hidrodinamic.

3.5 Considerînd conductivitatea unui sistem ca fiind:

$$\sigma(\vec{q}, \omega) = \frac{\sigma}{1 - i\omega\tau} \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

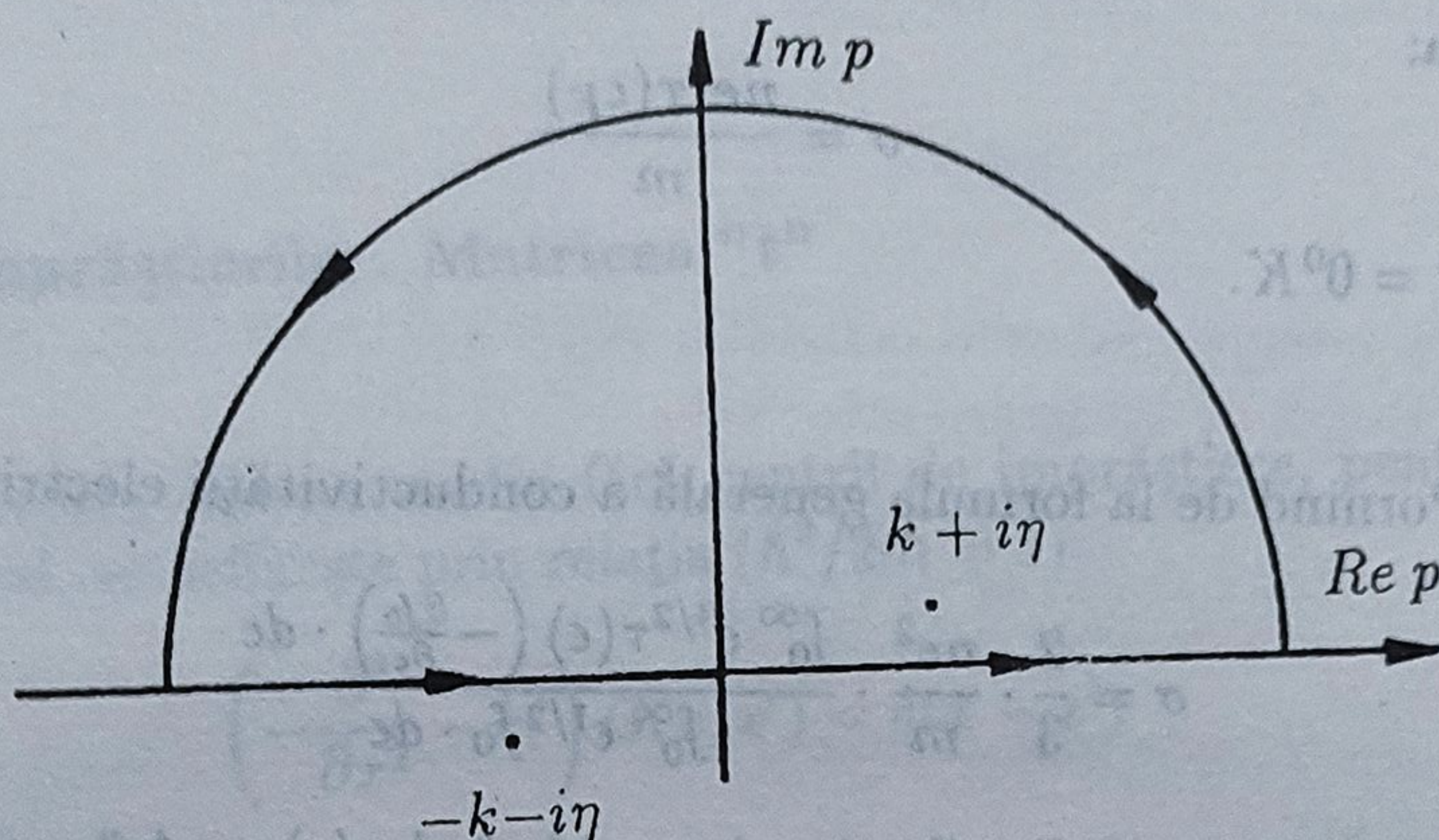
calculați $\chi''(\vec{q}, \omega)$ precum și valoarea momentului de ordinul doi pentru funcția de răspuns $\chi(\vec{q}, \omega)$.

cu polii corespunzători:

$$p = k + i\eta$$

$$p = -k - i\eta$$

Dacă: $x - x' > 0$ vom închide conturul de integrare prin semiplanul superior:

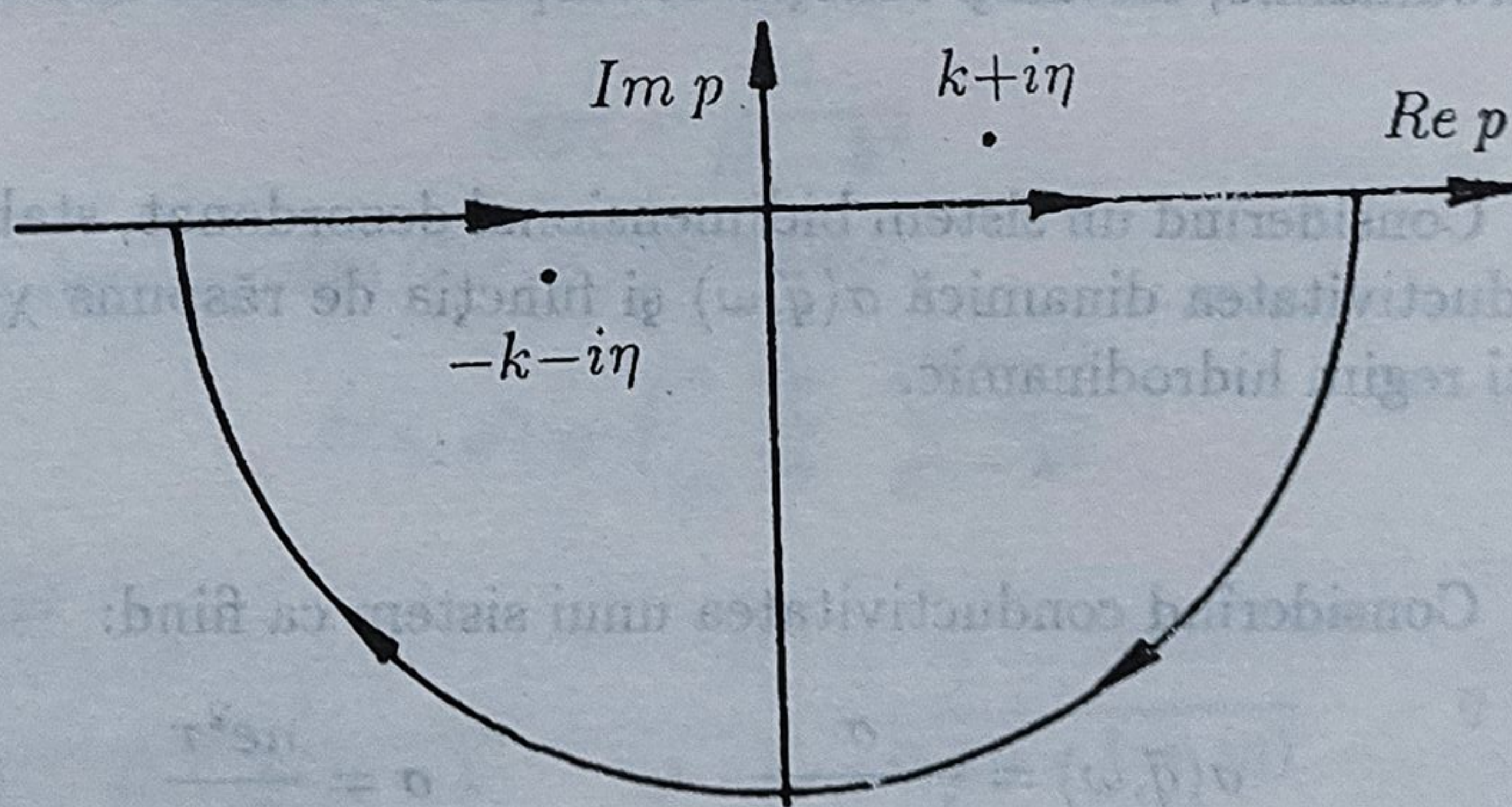


și:

$$G(x, x') = \lim_{\eta \rightarrow 0} 2\pi i \lim_{p \rightarrow k + i\eta} (p - k - i\eta) \frac{1}{2\pi} \frac{e^{ip(x-x')}}{(p - k - i\eta)(p + k + i\eta)} =$$

$$= i \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^{ik(x-x')} e^{-\eta(x-x')}}{2(k + i\eta)} = \frac{e^{ik(x-x')}}{-2ik}$$

Dacă: $x - x' < 0$ vom închide conturul de integrare prin semiplanul inferior:



și avem:

$$G(x, x') = \lim_{\eta \rightarrow 0} (-2\pi i) \lim_{p \rightarrow -k - i\eta} (p + k + i\eta) \frac{1}{2\pi} \frac{e^{ip(x-x')}}{(p - k - i\eta)(p + k + i\eta)} =$$

$$= -i \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{e^{-ik(x-x')} e^{\eta(x-x')}}{2(-k - i\eta)} = \frac{e^{-ik(x-x')}}{-2ik}$$

Cum însă:

$$|x - x'| = \begin{cases} x - x' & \text{dacă } x - x' > 0 \\ -(x - x') & \text{dacă } x - x' < 0 \end{cases}$$

putem reuni ambele rezultate de mai sus în formula:

$$G(x, x') = \frac{e^{ik|x-x'|}}{-2ik} \quad (4.5)$$

Ecuatia Schrödinger în prezența impurităților

Ecuatia Schrödinger, în unități $\hbar^2/2m = 1$, este:

$$-\nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (4.6)$$

Ca termen de energie potențială, pentru centrii de împrăștiere punctiformi, considerăm expresia:

$$V(\vec{r}) = - \sum_i u \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (4.7)$$

unde \vec{R}_i desemnează pozițiile centrilor de împrăștiere, iar $u = \text{constant}$.

Pentru a introduce noțiunea de matrice "t" vom porni cu următorul exemplu simplu: Imprăștierea unei unde incidente pe un singur centru de împrăștiere (punctual) și în cazul unidimensional. Ecuatia Schrödinger, pentru $d = 1$, și cu un singur centru de împrăștiere, situat la $x = x_0$, este:

$$-\psi''(x) - u\delta(x - x_0)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.8)$$

Considerînd că unda care vine de la $-\infty$ este e^{ikx} , soluția problemei (4.8) este

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ik(x-x_0)} & , x \leq x_0 \\ Be^{ik(x-x_0)} & , x \geq x_0 \end{cases} \quad (4.9)$$

Constantele A și B se determină folosind continuitatea lui $\psi(x)$ la x_0 și condiția pentru derivată. Continuitatea este:

$$\psi(x_0^-) = \psi(x_0^+)$$

sau:

$$e^{ikx_0} + A = B \quad (4.10)$$

Condiția pentru derivată se obține integrând o dată ecuația (4.8), între limitele $x_0 - \epsilon$ și $x_0 + \epsilon$ (unde $\epsilon \rightarrow 0$). Vom avea:

$$-\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} d\left(\frac{d\psi}{dx}\right) - u \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \psi(x) \delta(x - x_0) dx = E \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \psi(x) dx$$

sau:

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_0+\epsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_0-\epsilon} + u\psi(x_0) = 0$$

Aici:

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_0+\epsilon} = iBk$$

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_0-\epsilon} = ike^{ikx_0} - ikA$$

$$\psi(x_0) = B$$

Atunci, cea de-a doua condiție este:

$$ikB - ike^{ikx_0} + ikA + uB = 0 \quad (4.11)$$

(4.10) și (4.11) formează sistemul:

$$\begin{cases} e^{ikx_0} + A = B \\ (ik + u)B + ikA - ike^{ikx_0} = 0 \end{cases} \quad (4.12)$$

cu soluțiile:

$$A = -\frac{ue^{ikx_0}}{u + 2ik}$$

$$B = \frac{2ike^{ikx_0}}{u + 2ik}$$

Atunci:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} - \frac{u}{u+2ik} e^{-ik(x-x_0)} e^{ikx_0}, & x \leq x_0 \\ \frac{2ik}{u+2ik} e^{ikx}, & x \geq x_0 \end{cases}$$

Aceste două rezultate pot fi reunite într-o singură formulă:

$$\psi(x) = e^{ikx} - \frac{u}{u+2ik} e^{ik|x-x_0|} e^{ikx_0} \quad (4.13)$$

(4.13) se rescrie astfel:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{e^{ik|x-x_0|}}{-2ik} \frac{u}{1 - iu/2k} e^{ikx_0} = e^{ikx} + G(x, x_0) t e^{ikx_0} \quad (4.14)$$

Primul termen din (4.14) este unda incidentă. Al doilea termen reprezintă unda la poziția x_0 a centrului de împrăștiere, unde ea "preia" un factor de împrăștiere "t":

$$t = \frac{u}{1 - \frac{iu}{2k}} \quad (4.15)$$

Observînd că:

$$G(x_0, x_0) \equiv G = \frac{1}{-2ik} = \frac{i}{2k}$$

exemplul discutat mai sus ne duce la concluzia că:

$$t \equiv t(x_0) = \frac{u}{1 - uG(x_0, x_0)} \equiv \frac{u}{1 - uG} \quad (4.16)$$

Rezultatul (4.16) reprezintă scrierea condensată a seriei de puteri (după u):

$$t = u + uGu + uGuGu + uGuGuGu + \dots$$

căreia îi corespunde următoarea reprezentare diagramatică:

$$t = x + \overset{\text{---}}{\underset{\text{---}}{\times \text{---} \times}} + \overset{\text{---}}{\underset{\text{---}}{\times \text{---} \times \text{---} \times}} + \overset{\text{---}}{\underset{\text{---}}{\times \text{---} \times \text{---} \times \text{---} \times}} + \dots$$

Această serie se numește seria Born. Interpretarea fizică, corespunzătoare termenilor seriei este următoarea: Termenul de ordinul u^k descrie undele care ajung la centrul de împrăștiere, întorcîndu-se la el de $k - 1$ ori, înainte ca să-l părăsească pentru totdeauna. Liniile punctate curbate, de pe diagramă, indică faptul că împrăștierea rezultă de pe același centru împrăștiator.

În considerațiile noastre matricea "t" depinde de funcția Green G , care descrie propagarea într-un mediu fără centrul de împrăștiere. Totuși, în general funcția Green depinde de detalii legate de mediul în care au loc împrăștierea (cum ar fi prezența unor pereți sau alți centri de împrăștiere). Luarea lor în considerare se face prin metoda self-consistentă (v. mai jos). Dacă împrăștierea pe centri punctiformi are loc într-un sistem tridimensional ($d = 3$) va trebui să folosim funcția Green $G(\vec{r}, \vec{r}')$ care are expresia:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \simeq \frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} + \frac{ik}{4\pi} + O(|\vec{r}-\vec{r}'|) \quad (4.17)$$

Se observă că la $\vec{r}' = \vec{r}$, $G(\vec{r}, \vec{r}')$ este divergentă, deci luarea în considerare a acestei limite poate aduce probleme. Această problemă matematică apare atunci când considerăm centri de împrăștiere punctiformi. În realitate însă, centri de împrăștiere au întotdeauna o anumită rază, $1/\Lambda$, care conduce la eliminarea oricărei divergențe. Procedul acesta de eliminare a divergențelor poartă denumirea de regularizarea funcției Green. Funcția Green regularizată este:

$$G^{reg}(\vec{r}, \vec{r}') = \Lambda + \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \left[G(\vec{r}, \vec{r}') - \frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \right] = \Lambda + \frac{ik}{4\pi} \quad (4.18)$$

Revenind la cazul $d = 1$, pentru $u \rightarrow 0$ (weak scatterer), seria Born se taie, reținându-se numai primele două contribuții. Rezultatul obținut se numește aproximația Born de ordinul doi. În acest caz:

$$t = \frac{u}{1 - iu/2k} \simeq u \left(1 + \frac{iu}{2k} \right) = u + \frac{iu^2}{2k}$$

Observând însă că:

$$\frac{1}{2k} = \text{Im} G(x_0, x_0)$$

avem:

$$t = u + iu^2 \text{Im} G(x_0, x_0) \quad (4.19)$$

Pentru cazul $d = 3$ avem o relație asemănătoare:

$$t = u + iu^2 \text{Im} G(\vec{r}, \vec{r}) \equiv u + iu^2 \text{Im} G^{reg}(\vec{r}, \vec{r}) = u + iu^2 \frac{k}{4\pi} \quad (4.20)$$

Cu ajutorul funcției Green regularizate, matricea "t" devine:

$$t = \frac{u}{1 - uG^{reg}(\vec{r}, \vec{r})} = \frac{u}{1 - u(\Lambda + ik/4\pi)} = \frac{U_{ef}}{1 - U_{ef} \frac{ik}{4\pi}} \quad (4.21)$$

unde:

$$U_{ef} = \frac{u}{1 - u\Lambda} \quad (4.22)$$

adică o modificare a lui u cu cantitatea $(1 - u\Lambda)$. Se observă că $U_{ef} \rightarrow \infty$ atunci când $u\Lambda \rightarrow 1$.

Funcția Green în sistemele dezordonate

Mentținând încă unitățile în așa fel încît $\hbar^2/2m = 1$, în lipsa dezordinii aveam:

$$G(p) = \frac{1}{p^2 - k^2} = \frac{1}{p^2 - E} \quad (E = k^2)$$

După discuția cazului unui singur centru de împrăștiere vom considera problema împrăștierei în cazul mai multor centrii. În principiu, în acest caz, funcția Green trebuie să depindă de dezordine (adică de poziția și orientarea centrilor de împrăștiere). Făcînd medierea pe impurități (care reface invarianța la translații a sistemului) vom găsi funcția Green pentru sistemul dezordonat. Considerăm că în sistem impuritățile sînt distribuite în mod haotic. Efectul, în expresia funcției Green, corespunzător potențialului impurităților, constă în introducerea în expresia funcției Green libere a termenului de self-energie Σ , astfel încît vom obține:

$$\tilde{G}(p) = \frac{1}{p^2 - E - \Sigma} \quad (4.23)$$

(4.23) poate fi rescrisă astfel:

$$\tilde{G}(p) = \frac{1}{G^{-1}(p) - \Sigma} = \frac{G(p)}{1 - \Sigma G(p)}$$

sau:

$$G(p) = \tilde{G}(p) - G(p)\Sigma\tilde{G}(p)$$

deci:

$$\tilde{G}(p) = G(p) + G(p)\Sigma\tilde{G}(p) \quad (4.24)$$

(4.24) se numește ecuația Dyson. Ea poate fi regăsită și scriind:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(p) &= \frac{G(p)}{1 - \Sigma G(p)} = G(p) [1 + \Sigma G(p) + (\Sigma G(p))^2 + \dots] = \\ &= G(p) + G(p)\Sigma G(p) + G(p)\Sigma G(p)\Sigma G(p) + \dots = \\ &= G(p) + G(p)\Sigma [G(p) + G(p)\Sigma G(p) + \dots] = G(p) + G(p)\Sigma\tilde{G}(p) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Relației (4.25) îi corespunde următoarea reprezentare diagramatică:

$$\text{---}=\text{---} = \text{---} + \text{---}\Sigma\text{---} + \text{---}\Sigma\text{---}\Sigma\text{---} + \dots$$

unde linia dublă corespunde lui $\tilde{G}(p)$, iar linia simplă lui $G(p)$. În cele ce urmează vom determina expresia lui Σ considerând impuritățile distribuite haotic și potențialul de forma:

$$V(\vec{r}) = - \sum_{i=1}^N u \delta(\vec{r} - \vec{R}_i)$$

N -reprezintă numărul de centrii de împrăștiere din volumul V . În aproximația Born de ordinul întâi expresia self-energiei este:

$$\begin{aligned} -\Sigma^{(1)} &= \int \frac{d^3 R_1}{V} \dots \frac{d^3 R_N}{V} \cdot V(\vec{r}) = -u \int \frac{d^3 R_1}{V} \dots \frac{d^3 R_N}{V} \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) = \\ &= -u \sum_{i=1}^N \int \frac{d^3 R_i}{V} \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) = -u \frac{N}{V} = -n_i u \end{aligned} \quad (4.26)$$

Mergînd pentru orice ordin din seria Born vom avea:

$$\Sigma = n_i t \quad (4.27)$$

O dezvoltare perturbativă pentru Σ este posibilă doar dacă concentrația de centrii împrăștiatori n_i este mică. Rezultatul (4.27), proporțional cu n_i , ia în considerare doar un set particular de procese de ciocnire și anume setul de ciocniri repetate care conduce la matricea "t". Această aproximație

este cunoscută sub numele de "independent-scatterer approximation" (ISA). În general este imposibil să considerăm toate procesele de ciocnire posibile. Totuși, adesea este posibil să luăm în considerare contribuții de ordine superior pentru anumite procese de împrăștiere considerate. Aceasta se face aplicând metoda self-consistentă. Vedem acest lucru în cazul ISA. În prealabil scriem:

$$\frac{1}{-\nabla^2 - k^2 - \Sigma} \equiv \frac{1}{-\nabla^2 - k_{ef}^2}$$

unde:

$$k_{ef} = \sqrt{k^2 + \Sigma} = \sqrt{k^2 + n_i t} \quad (4.28)$$

Metoda self-consistentă constă în înlocuirea lui:

$$t = \frac{u}{1 - u G^{reg}(\vec{r}, \vec{r})} \quad G^{reg}(\vec{r}, \vec{r}) = \Lambda + \frac{ik}{4\pi}$$

cu:

$$t = \frac{u}{1 - u \tilde{G}^{reg}(\vec{r}, \vec{r})} \quad \tilde{G}^{reg}(\vec{r}, \vec{r}) = \Lambda + \frac{ik_{ef}}{4\pi} \quad (4.29)$$

Atunci, în cazul ISA, avem:

$$t = \frac{u}{1 - u(\Lambda + ik_{ef}/4\pi)} = \frac{u}{1 - u\Lambda - \frac{iu}{4\pi}\sqrt{k^2 + n_i t}} \quad (4.30)$$

sau:

$$t = \frac{U_{ef}}{1 - U_{ef} \frac{i}{4\pi} \sqrt{k^2 + n_i t}}$$

Semnificația fizică a metodei self-consistente este următoarea: Ea descrie propagarea de la un centru de împrăștiere la altul într-un mediu în care există și alți centrii de împrăștiere, deci nu într-un spațiu liber. Astfel, self-consistența este un concept fundamental care conduce la satisfacerea unor legi de conservare (identități Ward).

Timpul de ciocnire

Revenim la expresia self-energiei:

$$\Sigma = n_i t = n_i \frac{U_{ef}}{1 - U_{ef} \frac{ik}{4\pi}}$$

care se rescrie astfel:

$$\Sigma = n_i U_{ef} \frac{1 + ikU_{ef}/4\pi}{1 + (kU_{ef}/4\pi)^2} \quad (4.31)$$

Partea imaginară a self-energiei este:

$$Im\Sigma = \frac{n_i k U_{ef}^2}{4\pi} \frac{1}{1 + (kU_{ef}/4\pi)^2} \quad (4.32)$$

- Dacă: $u\Lambda \rightarrow 1$ atunci $U_{ef} \rightarrow \infty$ și:

$$Im\Sigma = \frac{4\pi n_i}{k} \quad (4.33)$$

- Dacă: $u\Lambda \rightarrow 0, u \rightarrow 0$:

$$U_{ef} \simeq u$$

și:

$$Im\Sigma = \frac{n_i u^2 k}{4\pi} \quad (4.34)$$

Revenim la unități $\hbar^2/2m$ și considerăm cazul electronilor dintr-un solid (cînd $k \rightarrow k_F$). Atunci, pentru (4.33), vom avea:

$$Im\Sigma = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi n_i}{k_F} = \frac{n_i}{\pi} \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mk_F} = \frac{n_i}{\pi N(0)}$$

unde $N(0)$ este densitatea de stări energetice pentru o singură orientare a spinului (iar Σ are dimensiunea unei energii). Definim timpul de ciocnire τ prin:

$$\frac{\hbar}{2\tau} = Im\Sigma \quad (4.35)$$

și cu relația de mai sus avem:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2n_i}{\pi \hbar N(0)} \quad (4.36)$$

În limita opusă, corespunzătoare relației (4.34), vom avea:

$$Im\Sigma = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n_i u^2 k}{4\pi} = n_i \pi N(0) \left(\frac{\hbar^2 u}{2m} \right)^2$$

Notînd:

$$\frac{\hbar^2 u}{2m} = U$$

obţinem:

$$Im\Sigma = n_i \pi N(0) U^2$$

iar timpul de ciocnire este:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi n_i N(0) U^2}{\hbar} \quad (4.37)$$

Făcînd o analiză dimensională se poate vedea dacă relaţiile (4.36) şi (4.37) sînt corecte. Pentru aceasta observăm că:

$$\frac{\hbar^2}{m} \sim \frac{E}{k^2}$$

Atunci:

$$N(0) = \frac{mk_F}{2\pi^2 \hbar^2} \sim \frac{k^3}{E}$$

În plus, deoarece:

$$n_i \sim x^{-3} \quad \hbar \sim E \cdot t \quad kx \sim 1$$

observăm imediat că atît (4.36) cît şi (4.37) au dimensiunea inversului unei durate. În unităţi $\hbar^2/2m$, U_{ef} devine:

$$U_{ef} = \frac{u}{1 - u\tilde{\Lambda}} \rightarrow \tilde{U}_{ef} = \frac{U}{1 - U\tilde{\Lambda}}$$

Cum însă:

$$U\tilde{\Lambda} \sim 1$$

înseamnă că:

$$\tilde{\Lambda} \sim \frac{1}{U} \sim \frac{k^3}{E}$$

deci $\tilde{\Lambda}$ are dimensiune de densitate de stări. Atunci vom considera:

$$\tilde{\Lambda} \rightarrow N(0)$$

şi deci:

$$\tilde{U}_{ef} = \frac{U}{1 - UN(0)} \quad (4.38)$$

Cînd nu ne situăm în limitele $UN(0) \rightarrow 1$ sau $UN(0) \rightarrow 0$, $U \rightarrow 0$, $Im\Sigma$ se scrie:

$$Im\Sigma = n_i\pi N(0)\tilde{U}_{ef}^2 \frac{1}{1 + (\pi N(0)\tilde{U}_{ef})^2}$$

sau:

$$Im\Sigma = \frac{n_i\pi N(0)U^2}{(1 - UN(0))^2 + (\pi N(0)U)^2}$$

și de aici:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2n_i\pi N(0)U^2}{\hbar [(1 - UN(0))^2 + (\pi N(0)U)^2]} \quad (4.39)$$

Se observă că în limita $UN(0) \rightarrow 1$ obținem (4.36), iar cînd $UN(0) \rightarrow 0$, $U \rightarrow 0$, regăsim relația (4.37). Formula (4.36) corespunde limitei unitare, iar formula (4.37) aproximației Born de ordinul întâi.

Difuzia cuantică

Teoria standard a fenomenelor de transport, în conductori, se bazează pe ecuația de transport a lui Boltzmann. Aici se consideră că în intervalul dintre două ciocniri succesive electronii se mișcă pe traiectorie în mod similar cu particulele descrise de mecanica clasică. Această aproximație este adevărată atunci cînd efectele de interferență a două unde împrăștiate de centrii diferiți sînt neglijabile. Folosind deci argumente clasice, conductivitatea electrică este:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{ne^2}{m} \cdot \frac{l}{v_F} \quad (4.40)$$

l -este drumul liber mediu între ciocnirile elastice succesive. Valoarea acestui drum liber mediu se poate exprima în funcție de secțiunea de ciocnire S și de concentrația de centrii împrăștiatori N :

$$l = \frac{1}{NS} \quad (4.41)$$

astfel încît:

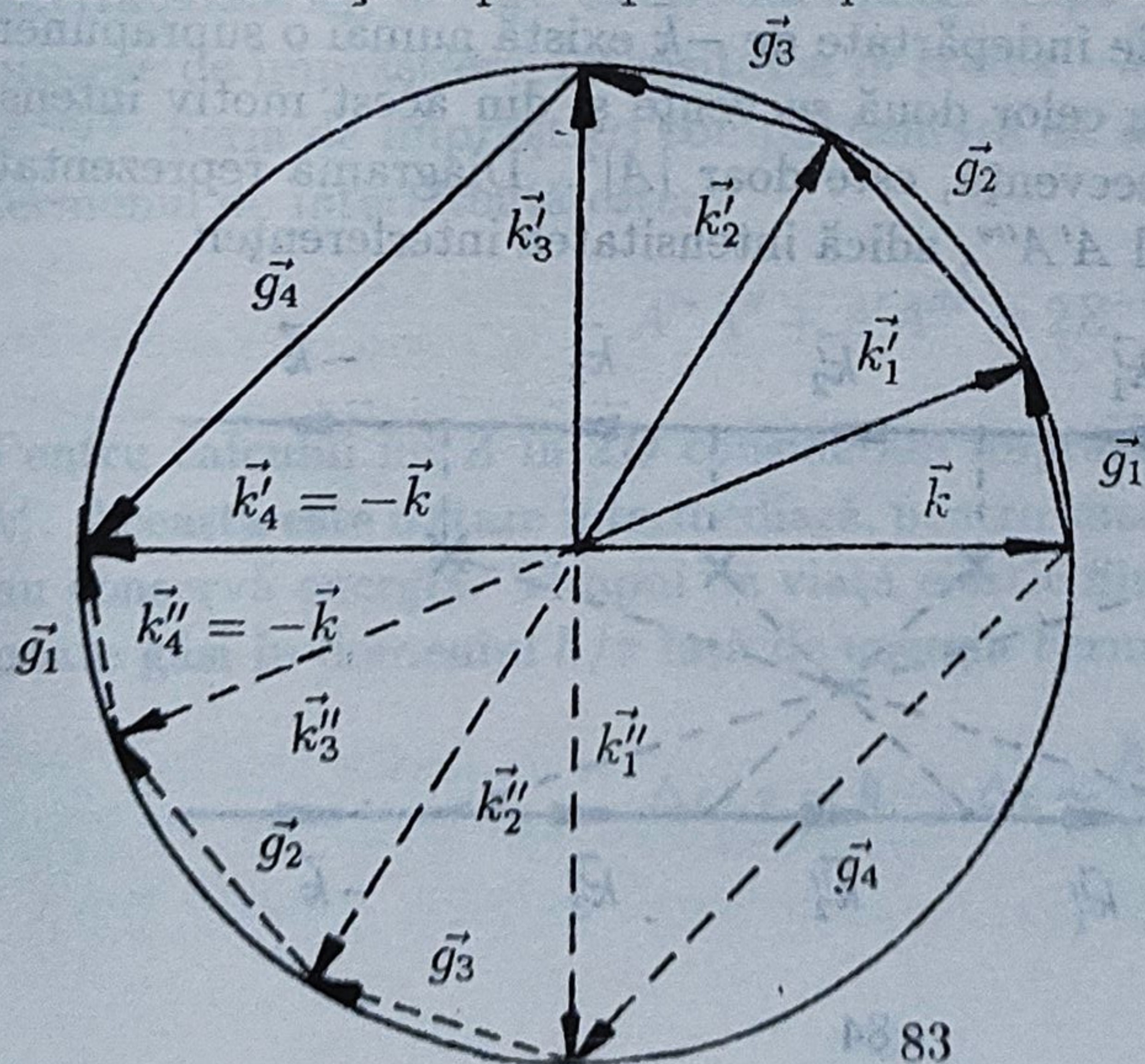
$$\sigma = \frac{ne^2}{m} \cdot \frac{1}{NSv_F} \rightarrow \rho \sim N \quad (4.42)$$

ρ -fiind rezistivitatea electrică a materialului.

Considerăm că electronul este împrăștiat de către fiecare centru sub forma unei unde sferice, iar intensitatea rezultantă într-un anumit punct este rezultatul unei suprapuneri de tip "random phase". În această situație intensitatea rezultantă este suma simplă a intensităților undelor. Dacă $l \gg \lambda$, unde $\lambda = h/p_F$ este lungimea de undă asociată electronului, noțiunea de traiectorie clasică poate fi folosită și, în primă aproximație, rezistivitatea electrică este proporțională cu concentrația de centrii împrăștiatori. (cf.ec.(4.42)). Dacă concentrația de centrii împrăștiatori crește, atunci, din (4.41), se vede că l scade, iar raportul λ/l crește. În această situație trebuiesc făcute corecții la formula conductivității, deoarece efectele de interferență a undelor împrăștiate de diverși centrii nu mai sînt neglijabile. Pentru a analiza corecțiile cuantice la conductivitate vedem situația care conduce la "ecoul" unui electron de conducție împrăștiat. Considerăm la momentul $t = 0$ un electron cu impulsul \vec{k} și cu funcția de undă corespunzătoare $e^{i\vec{k}\vec{r}}$. Din starea \vec{k} electronul este împrăștiat după timpul τ în starea \vec{k}'_1 , după timpul 2τ în starea \vec{k}'_2 , ș.a.m.d. Există o probabilitate finită ca după n evenimente de împrăștiere, electronul să ajungă în vecinătatea stării $-\vec{k}$, secvențele de împrăștiere fiind:

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}'_1 \rightarrow \vec{k}'_2 \rightarrow \dots \rightarrow \vec{k}'_{n-1} \rightarrow \vec{k}'_n \equiv -\vec{k}$$

Aceste secvențe se pot reprezenta prin următoarea figură (în spațiul \vec{k}):



Impulsurile de transfer sînt $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \dots, \vec{g}_n$.

Există însă o probabilitate egală, pentru electronul de impuls \vec{k} , de a fi împrăștiat prin n secvențe, din starea \vec{k} în starea $-\vec{k}$, prin următoarea succesiune:

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1'' \rightarrow \vec{k}_2'' \rightarrow \dots \rightarrow \vec{k}_{n-1}'' \rightarrow \vec{k}_n'' \equiv -\vec{k}$$

aici impulsurile de transfer fiind $\vec{g}_n, \vec{g}_{n-1}, \dots, \vec{g}_1$. Această serie de împrăstieri este deasemenea cuprinsă în figura de mai sus. Vom numi cea de-a doua succesiune de împrăstieri, **serie complementară**, ea avînd aceleași modificări de impuls, dar în succesiune inversată. Dacă starea finală este $-\vec{k}$ atunci stările intermediare, pentru ambele procese, se așază simetric față de origine. Aici se cuvine să mai facem și observația că amplitudinea în starea finală $-\vec{k}$ este aceeași pentru ambele secvențe de împrăstiere. Aceasta deoarece amplitudinea finală este proporțională cu produsul elementelor de matrice $\prod_i V(\vec{g}_i)$, unde $V(\vec{g}_i)$ este componenta Fourier "i" a potențialului de împrăstiere, iar acest produs are aceeași valoare pentru ambele secvențe. Dacă amplitudinile finale A' și A'' sînt coerente și egale $A' = A'' = A$, atunci intensitatea totală este:

$$|A' + A''|^2 = |A'|^2 + |A''|^2 + A'^* A'' + A' A''^* = 4|A|^2$$

(ultimii doi termeni din expresia de mai sus reprezintă partea de interferență). Dacă cele două amplitudini nu sînt coerente atunci intensitatea totală pentru cele două secvențe complementare este $2|A|^2$. Pentru alte stări de la suprafața Fermi, suficient de îndepărtate de $-\vec{k}$ există numai o suprapunere necoerentă corespunzătoare celor două secvențe și din acest motiv intensitatea de împrăstiere, per secvență, este doar $|A|^2$. Diagrama reprezentată mai jos dă tocmai produsul $A' A''^*$, adică intensitatea interferenței:

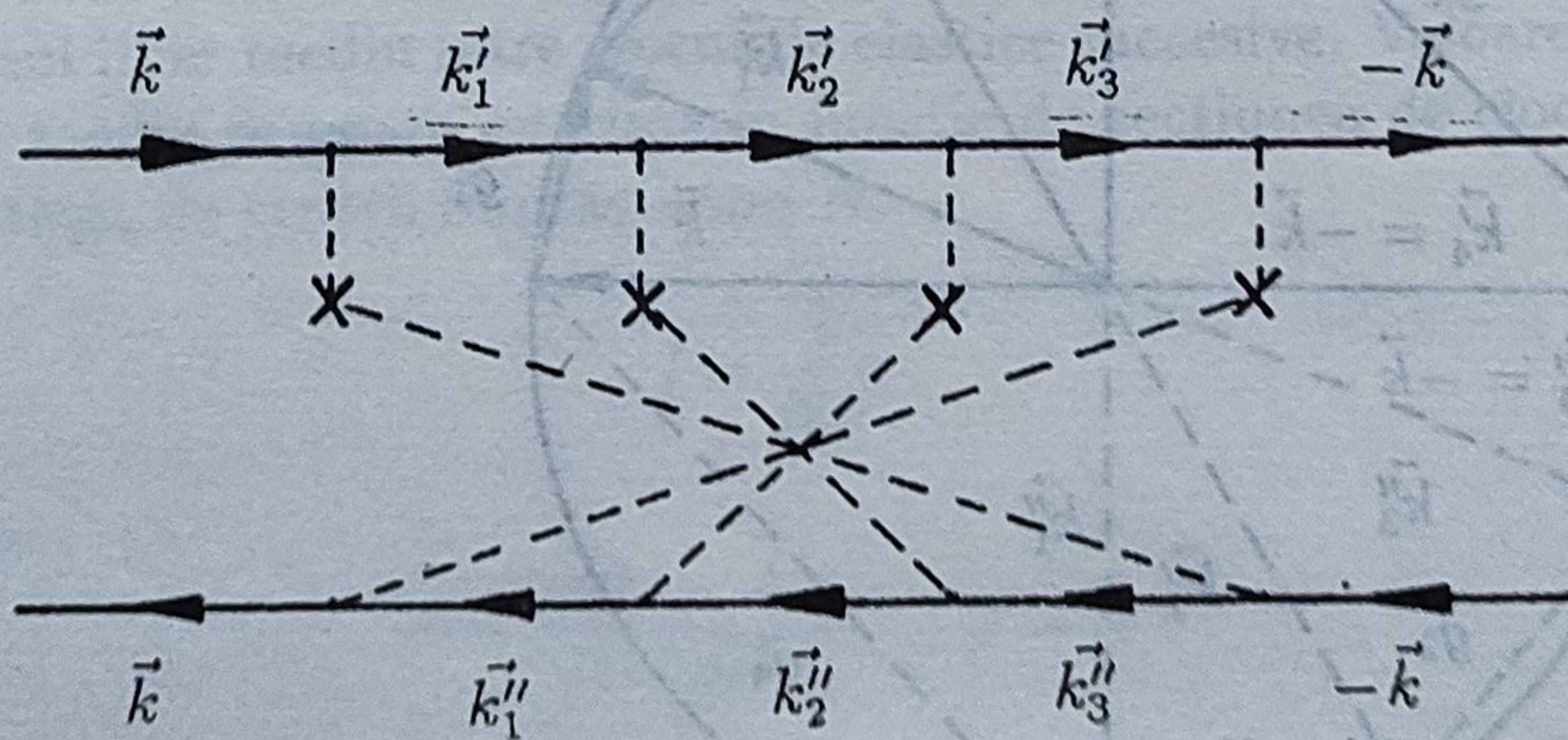


Diagrama constă din două părți, propagatorul electronic (superior) și propagatorul golului (inferior). Linia superioară dă amplitudinea corespunzătoare electronului de impuls \vec{k} , care este împrăștiat în starea $-\vec{k}$ prin secvențele ('). Dacă inversăm săgețile în propagatorul inferior, rezultă amplitudinea corespunzătoare electronului de impuls \vec{k} , care este împrăștiat în starea $-\vec{k}$ prin secvențele de împrăștiere ("). Direcția inversată a săgeților dă complex conjugata amplitudinii. Dacă discuția se reface la temperaturi finite, trebuie avut în vedere că procesele de împrăștiere sînt parțial inelastice. Drept consecință, amplitudinile A' și A'' își pierd coerența după timpul τ_i . Atunci, intensitatea undei împrăștiată înapoi va fi $2|A|^2$, iar împrăștierea înapoi coerentă dispăre după timpul τ_i . Pe baza considerațiilor de mai sus putem spune că impulsul electronului descrește în timp, dar pe măsură ce timpul trece apare "ecoul" electronului împrăștiat, cu impulsul $-\vec{k}$. Acest "ecou" reduce contribuția electronului la curentul electric și dă naștere la corecții în formula conductivității. Pentru cazul unui sistem bidimensional ($2D$) aceste corecții sînt proporționale cu $\ln(\tau_i/\tau)$. Pentru a justifica, că într-adevăr corecțiile cuantice la conductivitate sînt de tipul indicat mai sus procedăm, pentru început, la o discuție semicalitativă a împrăstierii: Considerăm că după timpul elastic τ , electronul de impuls \vec{k} este împrăștiat într-o zonă îngustă la suprafața Fermi. Considerăm că această zonă conține Z stări intermediare. Atunci, amplitudinea în starea intermediară \vec{k}'_1 este proporțională cu $Z^{-1/2}$. Intensitatea (proporțională cu pătratul amplitudinii), în următoarea stare intermediară \vec{k}'_2 , în care electronul ajunge după timpul τ , este Z^{-2} . După n procese de împrăștiere, intensitatea în starea $-\vec{k}$ este Z^{-n} , iar amplitudinea $Z^{-n/2}$. Seria de împrăstieri complementară dă aceeași amplitudine. Atunci, termenul de interferență este:

$$A'^* A'' + A' A''^* = 2Z^{-n} \quad (4.43)$$

Pentru calculul lui Z în $2D$ considerăm împrăștierea din starea \vec{k} în starea \vec{k}'_1 . Aceasta este o stare intermediară, pentru succesiunea de împrăstieri, care nu conservă energia. Timpul de viață elastic fiind τ , starea intermediară se poate găsi în domeniul \hbar/τ față de energia Fermi:

$$\Delta\epsilon \cdot \tau \sim \hbar \rightarrow \Delta\epsilon \sim \frac{\hbar}{\tau}$$

Ținând seama de această observație, raza cercului Fermi se va modifica cu:

$$\Delta p = \frac{\hbar}{l}$$

Intr-adevăr, folosind:

$$p_F^2 = 2m\epsilon_F$$

și $\Delta\epsilon$, avem:

$$(p_F + \Delta p)^2 = 2m(\epsilon_F + \Delta\epsilon)$$

sau:

$$2m\epsilon_F + 2m\Delta\epsilon \simeq p_F^2 + 2p_F\Delta p$$

Cum:

$$p_F = mv_F$$

obținem:

$$\Delta p = \frac{\Delta\epsilon}{v_F} = \frac{\hbar}{\tau} \cdot \frac{\tau}{l} = \frac{\hbar}{l}$$

Atunci, aria disponibilă din spațiul \vec{k} va fi dată de:

$$A = 2\pi p_F \Delta p = 2\pi p_F \frac{\hbar}{l} \quad (4.44)$$

Z se obține prin multiplicarea relației (4.44) cu $1/(2\pi)^2$. Mergînd mai departe trebuie subliniat faptul că împrăștierea înapoi coerentă nu este restrînsă la starea exactă $-\vec{k}$, existînd un mic spot în jurul lui $-\vec{k}$, care își aduce contribuția la corecțiile din conductivitate. Atunci trebuie să calculăm intensitatea împrăstierii înapoi coerente în starea $-\vec{k} + \vec{q}$, care se întîlnește după n procese de împrăștiere. Stările intermediare prin care se trece diferă nu numai prin impuls ci, evident, și prin energie. Variația de energie este $\hbar\vec{q}\vec{v}_F$ și, deoarece faza se modifică cu cantitatea Et/\hbar , în decursul timpului τ între cele două unde complementare apare diferența de fază:

$$\frac{\hbar\vec{q}\vec{v}_F\tau}{\hbar} = \vec{q}\vec{v}_F\tau \quad (4.45)$$

Referitor la stările intermediare se impune următoarea observație importantă: Stările intermediare au direcții independente ale impulsului. De aici rezultă că diferențele de fază sînt independente în semn și valoare. Aceasta înseamnă

că numai pătratul deplasării de fază se adună, astfel încît, după n procese de împrăștiere avem:

$$(\Delta\varphi)^2 = n \cdot \overline{(\vec{q}\vec{v}_F\tau)^2} = n \cdot \frac{1}{2}(qv_F\tau)^2 = n \left(\frac{1}{2}v_F^2\tau\right) q^2\tau = nDq^2\tau \quad (4.46)$$

unde $D = v_F^2\tau/2$ este coeficientul de difuzie (el absoarbe factorul de dimensionalitate). (Media din (4.46) se calculează cu formula:

$$\int \frac{d\Omega}{S_d} v_i v_j = \delta_{ij} \frac{1}{d} v_F^2$$

d -fiind dimensionalitatea sistemului, iar S_d -fiind suprafața sferei unitare în d -dimensiuni).

Stările învecinate cu $-\vec{k}$ contribuie la împrăștierea înapoi printr-un factor proporțional cu $\exp(-Dq^2t)$, unde $t = n\tau$. Contribuția lor este însă slabă deoarece coerența scade odată cu creșterea lui n și q . Integrînd după \vec{q} obținem suprafața spotului pentru împrăștierea coerentă înapoi. În cazul bidimensional avem:

$$A_{spot} \sim \hbar^2 \int d^2q \cdot e^{-Dq^2t} \sim \int_0^{q_c=1/\sqrt{Dt}} 2q dq \cdot e^{-Dq^2t}$$

Integrala se calculează imediat, făcînd schimbarea de variabilă $x = Dq^2t$, și se găsește:

$$A_{spot} \sim \frac{\hbar^2}{Dt} \quad (4.47)$$

Atunci, porțiunea de împrăștiere înapoi coerentă (fracțiunea din A) este:

$$I_{coh} = \frac{A_{spot}}{A} \sim \frac{\hbar^2}{Dt} \cdot \frac{l}{2\pi p_F \hbar} \quad (4.48)$$

Folosind:

$$\frac{l^2}{D} = \tau \quad (4.49)$$

găsim:

$$I_{coh} \sim \frac{\tau}{2\pi k_F l t} \quad (4.50)$$

În prezența unui câmp electric exterior, electronii de conducție vor contribui la curent, dar "ecoul" sau împrăștierea coerentă înapoi reduce valoarea curentului și implicit, conductivitatea electrică. Deci, un câmp electric aplicat pentru

scurt timp generează un curent în direcția câmpului și un curent invers care se atenuează în timp. Contribuția negativă la conductivitate se obține folosind I_{coh} , mai precis integrând expresia corespunzătoare între τ și τ_i :

$$\frac{\tau}{2\pi k_F l} \int_{\tau}^{\tau_i} \frac{dt}{t} = \frac{\tau}{2\pi k_F l} \ln \left(\frac{\tau_i}{\tau} \right) \quad (4.51)$$

cu ajutorul căreia, conductivitatea totală devine:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \left[1 - \frac{1}{2\pi k_F l} \ln \left(\frac{\tau_i}{\tau} \right) \right] \quad (4.52)$$

n -fiind concentrația de electroni.

Consecința importantă a considerațiilor făcute este aceea că electronii de conducție prezintă un efect tipic de interferență. Unda inițială \vec{k} este despăcată în două unde complementare \vec{k}' și \vec{k}'' . Cele două unde se propagă individual, iar în final se unifică în starea $-\vec{k}$, unde interferează. Intensitatea interferenței se măsoară prin conductivitate (rezistivitate). În cazul discutat mai sus, interferența este efectivă în intervalul de timp de la τ la τ_i .

Vedem în continuare problema corecțiilor cuantice la conductivitate din punctul de vedere al teoriei sistemelor de multe particule. Hamiltonianul de perturbație este:

$$H_{ext} = - \int d^d x \cdot \vec{A}(\vec{x}, t) \cdot \vec{j}(\vec{x}) \quad (4.53)$$

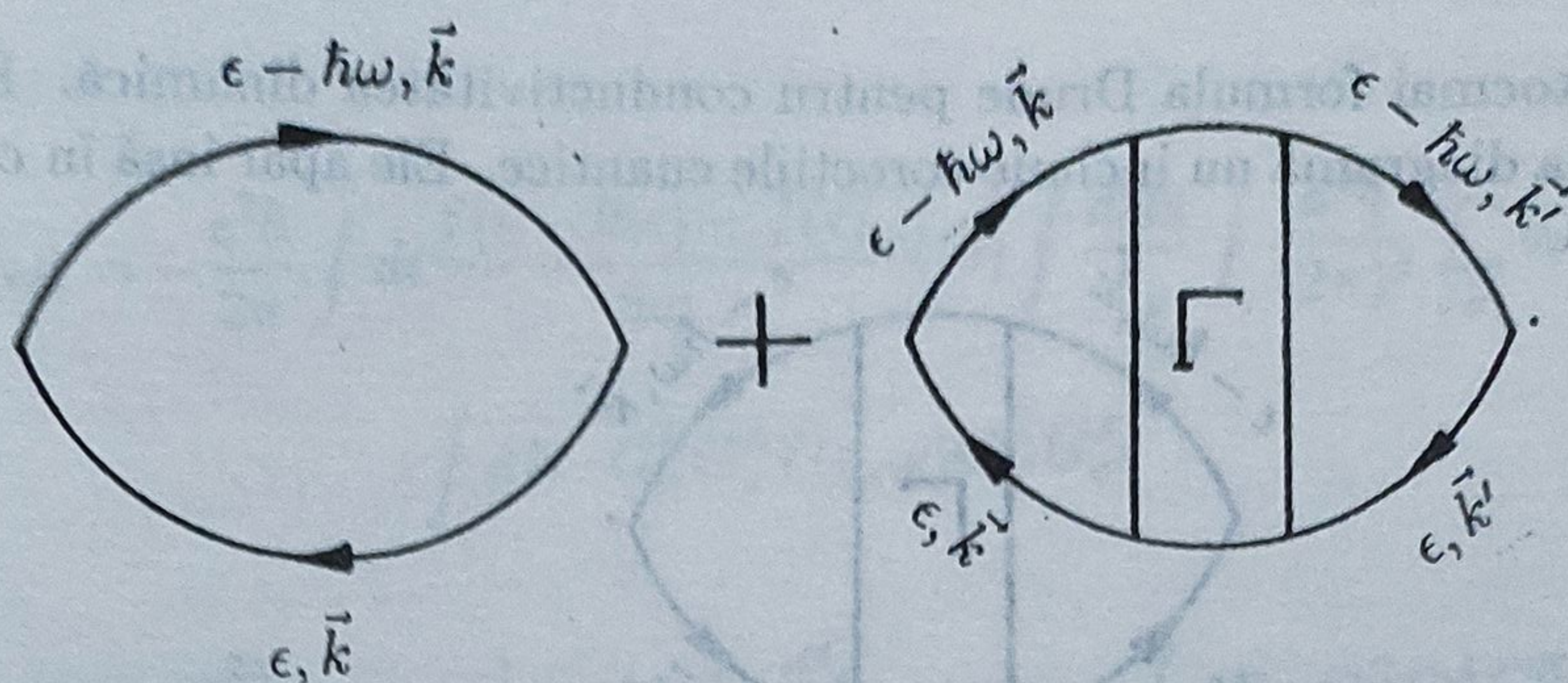
unde \vec{j} este densitatea de curent:

$$\vec{j}(\vec{x}) = -\frac{ie}{2m} [\psi^+ \nabla \psi - (\nabla \psi) \psi^+]$$

iar $\vec{A}(\vec{x})$ este potențialul vector. Conductivitatea dependentă de \vec{q} și ω este dată de formula Kubo:

$$\sigma_{\mu\nu}(\vec{q}, \omega) = i \int_{-\infty}^0 dt \langle [\vec{j}_{\mu}(\vec{q}, 0), \vec{j}_{\nu}(-\vec{q}, t)] \rangle \frac{\exp(i\omega t)}{i\omega} - \frac{ne^2}{m} \frac{1}{i\omega} \delta_{\mu\nu} \quad (4.54)$$

Comutatorul curent-curent conduce la propagatori electron-gol de tipul celor reprezentați în figura de mai jos:



Contribuția primei diagrame la conductivitate este:

$$\sigma_{ij}^{(1)}(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{2\pi} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon - \hbar\omega) - f(\epsilon)}{\hbar\omega} \cdot \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \sum_{\sigma} v_i(\vec{k}) v_j(\vec{k}) G_{\sigma}^R(\epsilon, \vec{k}) G_{\sigma}^A(\epsilon - \hbar\omega, \vec{k}) \quad (4.55)$$

unde:

$$v_i(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE(\vec{k})}{dk_i}$$

este componenta i a vitezei (E -fiind energia cinetică),

$$G_{\sigma}^R(\epsilon, \vec{k}) = \frac{1}{\epsilon - E(\vec{k}) + \frac{i\hbar}{2\tau}} \quad G_{\sigma}^A(\epsilon, \vec{k}) = \frac{1}{\epsilon - E(\vec{k}) - \frac{i\hbar}{2\tau}}$$

sînt funcțiile Green retardată și avansată (v.(4.23), unde $Re\Sigma$ a fost absorbit în potențialul chimic), τ -timpul de ciocnire, iar sumarea după stările de spin este deasemenea inclusă. În evaluarea lui $\sigma_{ij}^{(1)}(\omega)$ apar integrale de forma:

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} B(\vec{k}) G^R G^A \rightarrow N(0) \int \frac{d\Omega_k}{S_d} B(k_F) \int dE \cdot G^R G^A$$

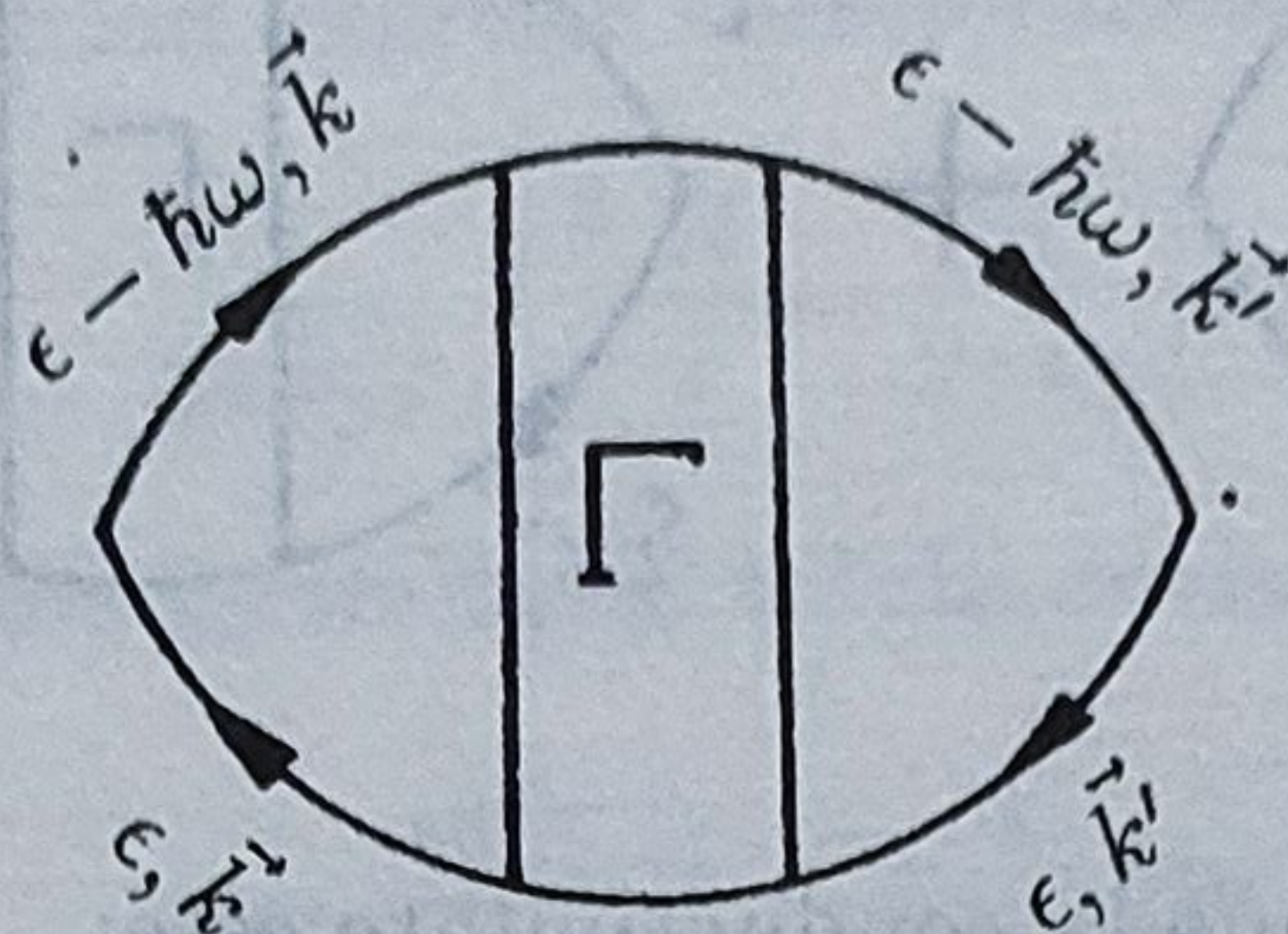
Aici $N(0)$ este densitatea de stări pentru o singură orientare a spinului. Evaluînd integrala după E și folosind:

$$\int d\epsilon \frac{f(\epsilon - \hbar\omega) - f(\epsilon)}{\hbar\omega} = 1$$

obținem (v.probl.4.1):

$$\sigma^{(1)}(\omega) = \frac{2e^2 N(0) v_F^2 \tau}{d(1 - i\omega\tau)} \quad (4.56)$$

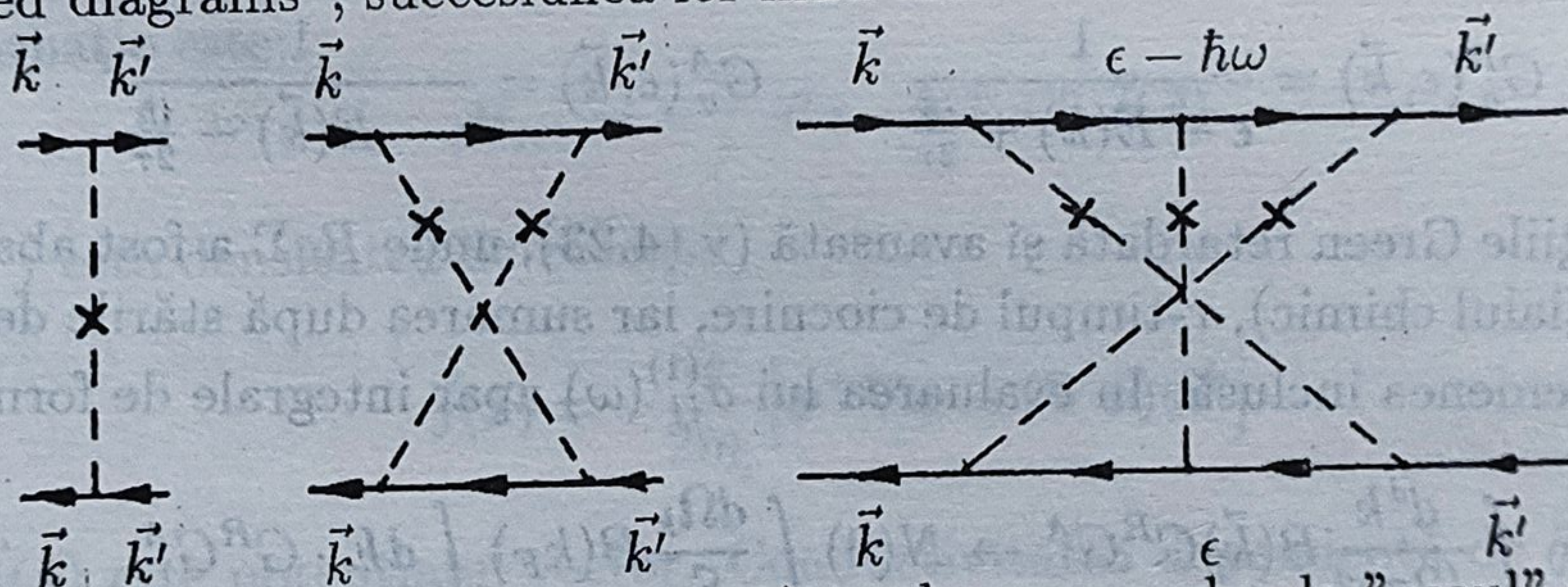
care este tocmai formula Drude pentru conductivitatea dinamică. Evident deci, prima diagramă nu include corecțiile cuantice. Ele apar însă în cea de-a doua:



iar expresia ei analitică este:

$$\sigma_{ij}^{(2)}(\omega) = -\frac{e^2 \hbar}{2\pi} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon - \hbar\omega) - f(\epsilon)}{\hbar\omega} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k'}{(2\pi)^d} \sum_{\sigma\sigma'} v_i(\vec{k}) v_j(\vec{k}') \cdot G_{\sigma}^R(\epsilon, \vec{k}) G_{\sigma'}^A(\epsilon - \hbar\omega, \vec{k}) \Gamma_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}'; \epsilon, \omega) G_{\sigma'}^R(\epsilon, \vec{k}') G_{\sigma}^A(\epsilon - \hbar\omega, \vec{k}') \quad (4.57)$$

Corecțiile cuantice consideră o categorie particulară de diagrame care descriu ciocnirea electronilor pe impurități și care poartă denumirea de "maximal crossed diagrams", succesiunea lor fiind următoarea:



Se observă că aceste diagrame sînt cele care conduc la "ecoul" unui electron de conducție împrăștiat. Valoarea acestui grup de propagatori este $\Gamma(\vec{k}, \vec{k}'; \epsilon, \omega)$. Γ depinde de $\vec{q} = \vec{k} + \vec{k}'$ ($\vec{k}' = -\vec{k} + \vec{q}$) și ω și diverge în limita $q, \omega \rightarrow 0$. Pentru a evalua (4.57) facem schimbarea de variabilă:

$$(\vec{k}; \vec{k}') \rightarrow (\vec{k}; \vec{q})$$

Atunci:

$$E' = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \simeq E - \hbar \vec{v}_F \cdot \vec{q} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

și:

$$\sigma_{ij}^{(2)}(\omega) = -\frac{e^2\hbar}{2\pi} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon - \hbar\omega) - f(\epsilon)}{\hbar\omega} N(0) \int \frac{d\Omega_k}{S_d} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \sum_{\sigma\sigma'} v_i v_j \cdot \int dE \cdot G_\sigma^R G_\sigma^A \Gamma(q, \omega) G_{\sigma'}^R G_{\sigma'}^A$$

sau:

$$\sigma_{ij}^{(2)}(\omega) = -\frac{e^2\hbar}{2\pi} N(0) \delta_{ij} \frac{1}{d} v_F^2 \sum_{\sigma\sigma'} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \cdot \Gamma(q, \omega) \int dE \cdot G_\sigma^R G_\sigma^A G_{\sigma'}^R G_{\sigma'}^A$$

Ultima integrală din expresia de mai sus este:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{\epsilon - E + i\hbar/2\tau} \cdot \frac{1}{\epsilon - \hbar\omega - E - i\hbar/2\tau} \cdot \frac{1}{\epsilon - (E - \hbar\vec{v}_F\vec{q}) + i\hbar/2\tau} \cdot \frac{1}{\epsilon - \hbar\omega - (E - \hbar\vec{v}_F\vec{q}) - i\hbar/2\tau}$$

Polii sînt:

$$\begin{aligned} E_1 &= \epsilon + \frac{i\hbar}{2\tau} & E_2 &= \epsilon - \hbar\omega - \frac{i\hbar}{2\tau} \\ E_3 &= \epsilon + \frac{i\hbar}{2\tau} + \hbar\vec{v}_F\vec{q} & E_4 &= \epsilon - \hbar\omega - \frac{i\hbar}{2\tau} + \hbar\vec{v}_F\vec{q} \end{aligned}$$

Inchizînd conturul de integrare prin semiplanul superior, în interiorul conturului avem polii simplii E_1 și E_3 , cu rezidurile corespunzătoare:

$$\text{Rez}(f(E); E_1) = -\frac{1}{\hbar\omega + i\hbar/\tau} \cdot \frac{1}{\hbar\vec{v}_F\vec{q}} \cdot \frac{1}{\hbar\omega - \hbar\vec{v}_F\vec{q} + i\hbar/\tau}$$

$$\text{Rez}(f(E); E_3) = \frac{1}{\hbar\omega + \hbar\vec{v}_F\vec{q} + i\hbar/\tau} \cdot \frac{1}{\hbar\vec{v}_F\vec{q}} \cdot \frac{1}{\hbar\omega + i\hbar/\tau}$$

Folosind aceste rezultate și considerînd $(\hbar\vec{v}_F\vec{q})^2$ neglijabil în raport cu ceilalți termeni:

$$I \simeq 4\pi \left(\frac{\tau}{\hbar}\right)^3 \frac{1}{(1 - i\omega\tau)^3}$$

În limita frecvențelor joase, $\omega\tau \ll 1$, și:

$$I \approx 4\pi \left(\frac{\tau}{\hbar}\right)^3$$

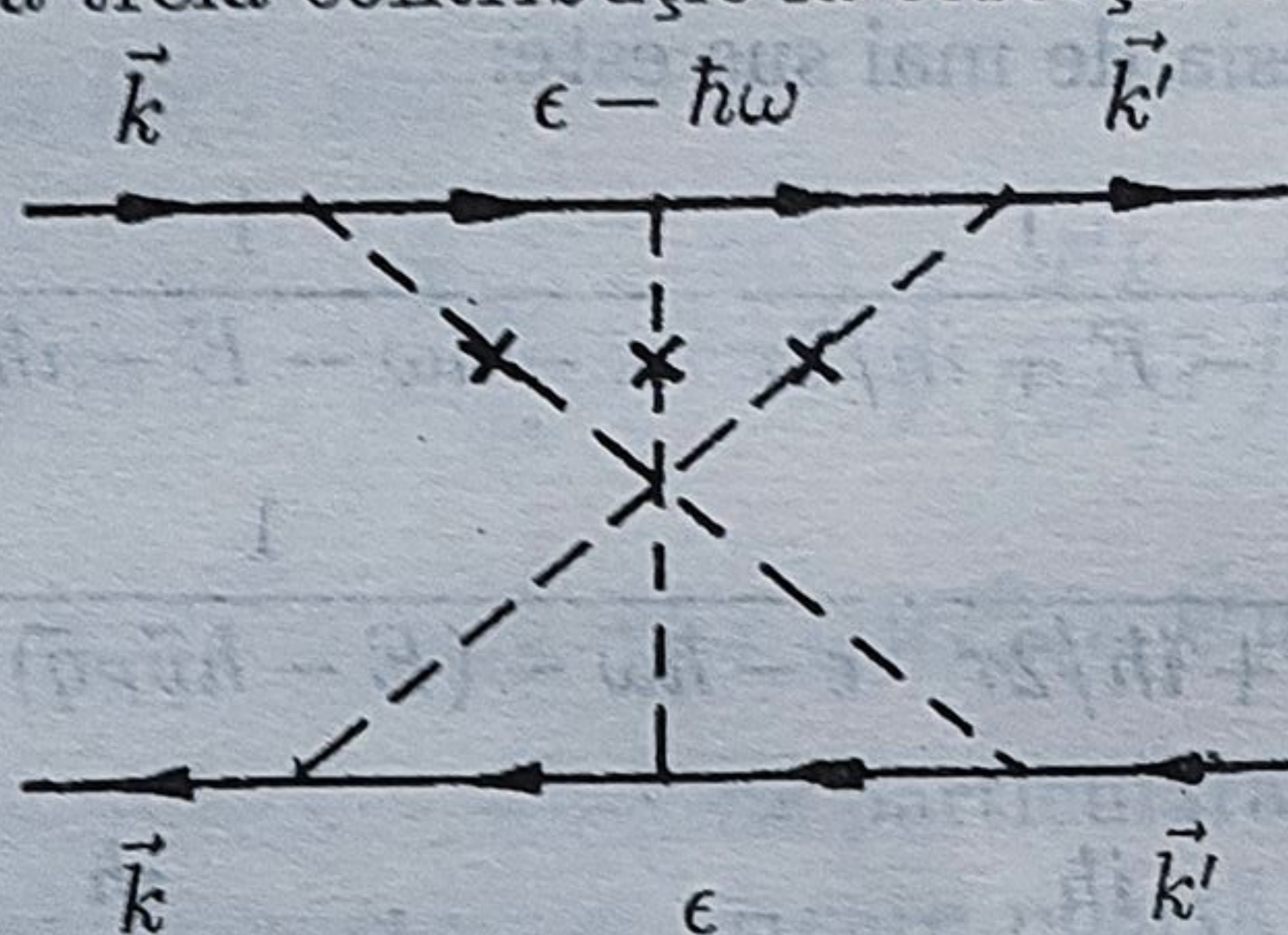
În această situație, cea de-a doua contribuție la conductivitate devine:

$$\sigma_{ij}^{(2)}(\omega \rightarrow 0) = \sigma^{(2)}(\omega \rightarrow 0) \cdot \delta_{ij}$$

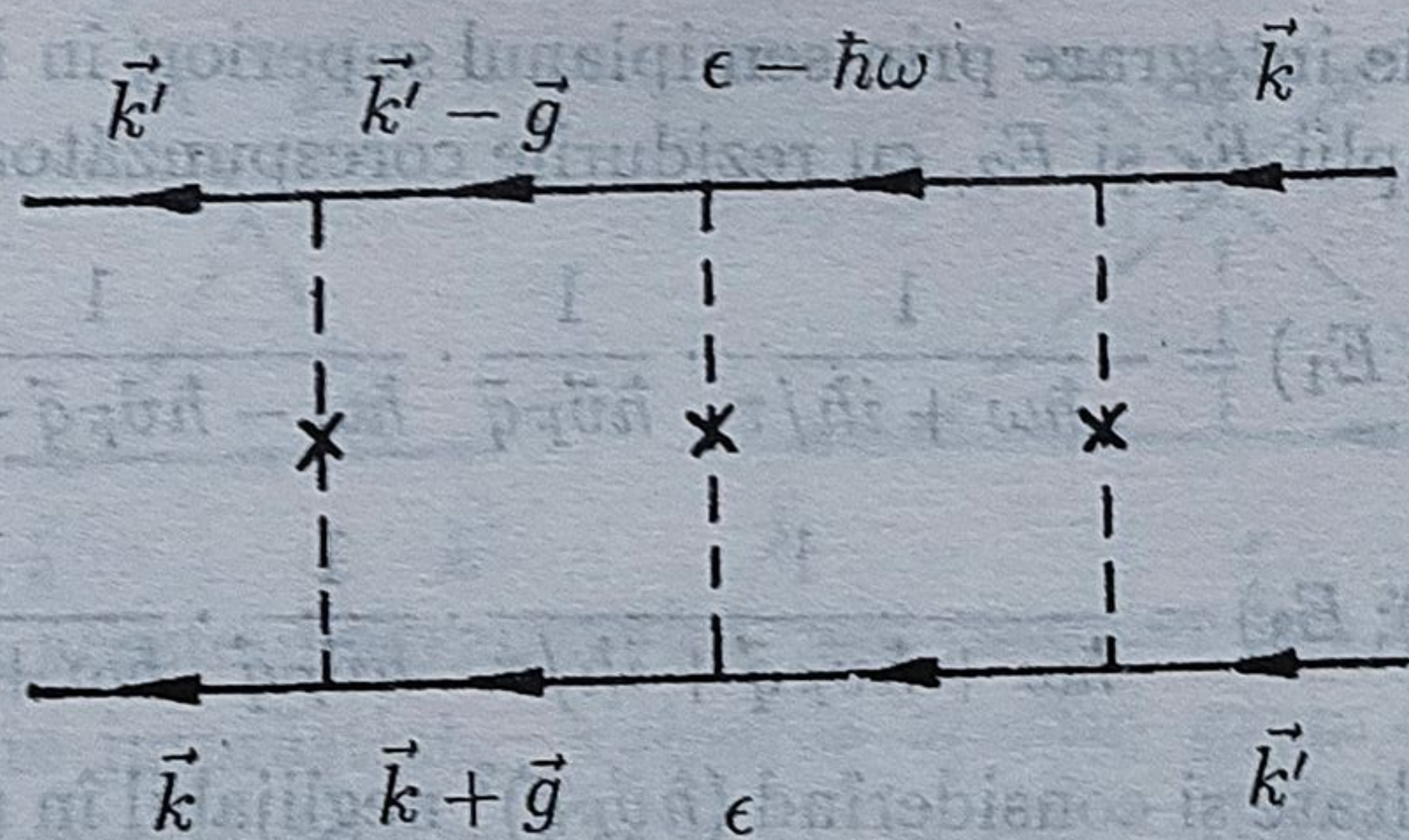
cu:

$$\sigma^{(2)}(\omega \rightarrow 0) = -\frac{2\pi N(0)\tau}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{\pi\hbar} \cdot D\tau \sum_{\sigma\sigma'} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \cdot \Gamma(q, \omega) \quad (4.58)$$

unde $D = v_F^2 \tau / d$ este coeficientul de difuzie. În cele ce urmează vom determina $\Gamma(q, \omega)$, ($\vec{q} = \vec{k} + \vec{k}'$), care apare în relația (4.58). Pentru aceasta să luăm, de exemplu, a treia contribuție la corecția cuantică:



Funcțiile Green și elementele de matrice pot fi rearanjate astfel încât propagatorul electron-gol să fie exprimat printr-un propagator mai simplu. Aceasta corespunde întoarcerii liniei superioare, astfel încât diagrama de mai sus devine:



Definind:

$$\Pi(\vec{q} = \vec{k} + \vec{k}'; \epsilon, \omega) = \int \frac{d^d g}{(2\pi)^d} \cdot G^R(\epsilon, \vec{k} + \vec{g}) G^A(\epsilon - \hbar\omega, \vec{k}' - \vec{g}) \quad (4.59)$$

diagrama de mai sus este:

$$\Gamma_0 \Pi \Gamma_0 \Pi \Gamma_0$$

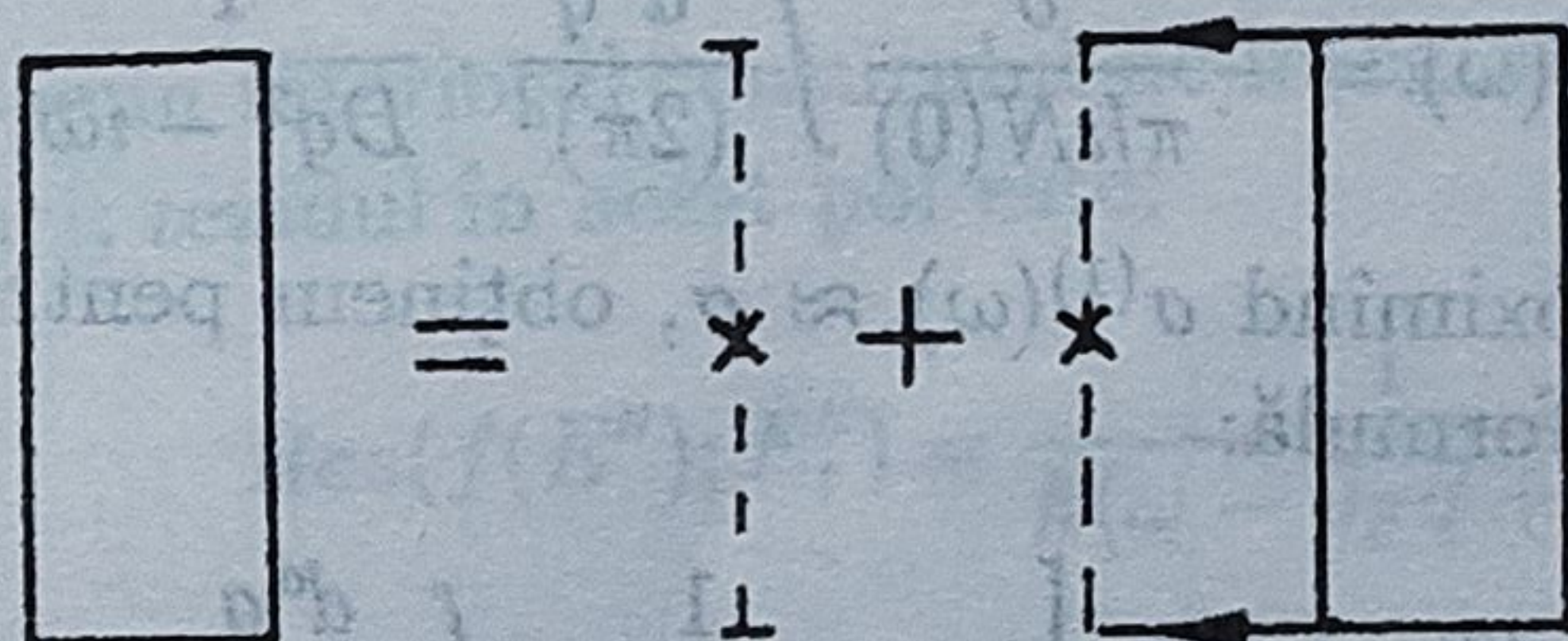
unde:

$$\Gamma_0 = \text{diagram with a vertical dashed line and a cross} = \frac{\hbar}{2\pi N(0)\tau} \quad (4.60)$$

((4.60) se găsește folosind (4.37) și observînd că $\Gamma_0 = n_i U^2$). Atunci, suma diagramelor "maximal crossed" este:

$$\Gamma = \Gamma_0 + \Gamma_0 \Pi \Gamma_0 + \Gamma_0 \Pi \Gamma_0 \Pi \Gamma_0 + \dots = \frac{\Gamma_0}{1 - \Gamma_0 \Pi} \quad (4.61)$$

care corespunde ecuației Dyson:



Expresia analitică este:

$$\Gamma(\vec{k} + \vec{k}'; \omega) = \Gamma_0 + \Gamma_0 \Pi(\vec{k} + \vec{k}'; \omega) \Gamma(\vec{k} + \vec{k}'; \omega) \quad (4.62)$$

Pentru a găsi Γ trebuie, în prealabil, să calculăm Π . Pentru aceasta introducem notațiile:

$$\vec{k} + \vec{g} = \vec{k}''$$

$$\vec{k} + \vec{k}' = \vec{q}$$

și de aici: $\vec{k}' - \vec{g} = -\vec{k}'' + \vec{q}$. Atunci Π devine:

$$\Pi = \int \frac{d^d k''}{(2\pi)^d} \cdot G^R(\epsilon, \vec{k}'') G^A(\epsilon - \hbar\omega, -\vec{k}'' + \vec{q})$$

Folosind:

$$\int \frac{d^d k''}{(2\pi)^d} \rightarrow N(0) \int \frac{d\Omega_{k''}}{S_d} \int dE''$$

Din (4.64) se vede că $\Gamma(q, \omega)$ **diverge** în limita $q, \omega \rightarrow 0$, prezentînd un **pol difuziv**. Corecția la conductivitate devine:

$$\sigma^{(2)}(\omega) = -\frac{2\pi N(0)\tau}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{\pi\hbar} \cdot D\tau \sum_{\sigma\sigma'} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \cdot \frac{\hbar}{2\pi N(0)\tau} \cdot \frac{1}{-i\omega\tau + Dq^2\tau} \quad (4.65)$$

sau:

$$\sigma^{(2)}(\omega) = -\frac{e^2}{\pi\hbar} \cdot D\tau \sum_{\sigma\sigma'} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \cdot \frac{1}{Dq^2\tau - i\omega\tau}$$

Făcînd sumarea după stările de spin și folosind:

$$\sigma = \frac{2e^2 N(0) v_F^2 \tau}{d} = 2e^2 N(0) D$$

avem:

$$\sigma^{(2)}(\omega) = -\frac{\sigma}{\pi\hbar N(0)} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \cdot \frac{1}{Dq^2 - i\omega} \quad (4.66)$$

Pentru $\omega\tau \ll 1$, aproximînd $\sigma^{(1)}(\omega) \approx \sigma$, obținem pentru conductivitatea electrică următoarea formulă:

$$\sigma(\omega) = \sigma^{(1)}(\omega) + \sigma^{(2)}(\omega) \simeq \sigma \left[1 - \frac{1}{\pi\hbar N(0)} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \cdot \frac{1}{Dq^2 - i\omega} \right] \quad (4.67)$$

Vedem în continuare la ce se reduce (4.67) pentru cazul bidimensional. În acest caz, folosind $d^2 q = 2\pi q dq$ precum și faptul că:

$$N(0) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$$

obținem:

$$\sigma(\omega) \simeq \sigma \left[1 - \frac{\hbar}{\pi m} \int_0^{1/\sqrt{D\tau}} \frac{q \cdot dq}{Dq^2 - i\omega} \right]$$

Limita superioară de integrare $q_c = 1/\sqrt{D\tau}$ este un impuls de tăiere. El corespunde celui mai mic pas difuziv, în spațiul impulsului, între două ciocniri succesive. Integrala din expresia de mai sus se evaluează făcînd schimbarea de variabilă: $Dq^2 - i\omega = x$, și cum $\omega\tau \ll 1$, avem:

$$\sigma(\omega) \simeq \sigma \left[1 + \frac{\hbar}{2\pi m D} \cdot \ln|\omega\tau| \right]$$

cu:

$$E(-\vec{k}'' + \vec{q}) \simeq E'' - \hbar \vec{v}_F \vec{q} \quad E'' = \frac{\hbar^2 k''^2}{2m}$$

avem:

$$\Pi = N(0) \int \frac{d\Omega_{k''}}{S_d} \cdot I_1$$

unde I_1 este integrala:

$$I_1 = \int dE'' \frac{1}{\epsilon + i\hbar/2\tau - E''} \cdot \frac{1}{\epsilon - \hbar\omega - i\hbar/2\tau - E'' + \hbar \vec{v}_F \vec{q}}$$

Polii corespunzători integrandului sînt:

$$E_1'' = \epsilon + \frac{i\hbar}{2\tau} \quad E_2'' = \epsilon - \hbar\omega + \hbar \vec{v}_F \vec{q} - \frac{i\hbar}{2\tau}$$

primul aflîndu-se în interiorul conturului de integrare, închis prin semiplanul superior. Atunci, rezidul în acest pol este:

$$\text{Rez}(f(E''); E_1'') = \frac{1}{\hbar(\omega - \vec{v}_F \vec{q} + i/\tau)}$$

Fracția de mai sus, pentru $(\omega\tau)^2$ neglijabil de mic, este:

$$\frac{1}{(\omega - \vec{v}_F \vec{q} + i/\tau)} \simeq \frac{\tau}{i} \left[1 + i\omega\tau + (2\omega\tau^2 - i\tau) \vec{v}_F \vec{q} - \tau^2 (\vec{v}_F \vec{q})^2 \right]$$

și:

$$I_1 \simeq \frac{2\pi\tau}{\hbar} \left[(1 + i\omega\tau) + (2\omega\tau^2 - i\tau) \vec{v}_F \vec{q} - \tau^2 (\vec{v}_F \vec{q})^2 \right]$$

deci:

$$\Pi \simeq \frac{2\pi N(0)\tau}{\hbar} \int \frac{d\Omega_{k''}}{S_d} \left[(1 + i\omega\tau) + (2\omega\tau^2 - i\tau) \vec{v}_F \vec{q} - \tau^2 (\vec{v}_F \vec{q})^2 \right]$$

de unde imediat:

$$\Pi \simeq \frac{2\pi N(0)\tau}{\hbar} (1 + i\omega\tau - Dq^2\tau) \quad (4.63)$$

Atunci:

$$\Gamma(q, \omega) = \frac{\hbar}{2\pi N(0)\tau} \cdot \frac{1}{-i\omega\tau + Dq^2\tau} \quad (4.64)$$

Folosind: $D = v_F^2 \tau / 2$, expresia de mai sus se rescrie sub forma:

$$\sigma(\omega) \simeq \sigma \left[1 + \frac{1}{\pi k_F l} \cdot \ln |\omega \tau| \right] \quad (4.68)$$

Observăm (în $2D$) că pentru $\omega = 0$, conductivitatea electrică (statică), pentru un sistem de electroni care nu interacționează între ei, prezintă o **divergență logaritmică**. Conductivitatea electrică $\sigma(\omega)$ dispăre la o anumită frecvență caracteristică ω_0 , pentru care:

$$1 + \frac{1}{\pi k_F l} \cdot \ln |\omega_0 \tau| = 0$$

deci:

$$\omega_0 = \frac{1}{\tau} \cdot e^{-\pi k_F l} \quad (4.69)$$

Această frecvență marchează punctul de trecere din regimul de conductor în **regimul localizat**. Fenomenul discutat aici poartă denumirea de **localizare slabă**. În cazul tridimensional ($3D$), conductivitatea statică, în limita $k_F l \gg 1$, este:

$$\sigma(\omega = 0) = \sigma \left[1 - \frac{\text{const.}}{(k_F l)^2} + O((k_F l)^{-3}) \right] \quad (4.70)$$

Acest rezultat, foarte popular, obținut de Mott, este mai puțin corect. Motivele sînt următoarele: în primul rînd, în limita $k_F l \gg 1$, există contribuții diagramatice suplimentare (neluate în considerare în obținerea ec.(4.70)), iar în al doilea rînd aceste contribuții nu sînt restrînse la limita hidrodinamică. Rezultatul unui calcul corect (Kirkpatrick și Belitz, 1986) este:

$$\sigma(\omega = 0) = \sigma \left[1 - \frac{2\pi}{3k_F l} + \frac{\pi^2 - 4}{8(k_F l)^2} \cdot \ln \frac{1}{k_F l} + O((k_F l)^{-2}) \right] \quad (4.71)$$

Observăm că principala corecție la rezultatul Boltzmann este o contribuție liniară în $1/k_F l$. De abia cea de-a treia corecție duce la contribuția proporțională cu $1/(k_F l)^2$.

Revenim la cazul $2D$ și considerăm cazul împrăstierilor inelastice. Corecțiile cuantice la conductivitate conțin efecte de amortizare, datorită împrăstierilor inelastice. Efectele de amortizare se dau prin înlocuirea lui $-i\omega$ cu $1/\tau_i$, astfel încît $\sigma^{(2)}$ devine:

$$\sigma^{(2)} = -\frac{e^2 D}{2\pi^2 \hbar} \int_0^{1/\sqrt{D\tau}} \frac{2q \cdot dq}{Dq^2 + 1/\tau_i}$$

Făcînd schimbarea de variabilă:

$$Dq^2 + \frac{1}{\tau_i} = x$$

și deoarece $\tau_i \gg \tau$, avem aproximativ:

$$\sigma^{(2)} \simeq -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \cdot \ln \frac{\tau_i}{\tau} \quad (4.72)$$

După găsirea corecției cuantice la conductivitate (ec.(4.66)), trebuie să facem legătura cu interpretarea fizică pe care aceasta o implică. Pentru aceasta considerăm că la momentul $t = 0$ aplicăm asupra probei un câmp electric de tip "δ":

$$E(t) = E_0 \cdot \delta(t) = E_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot e^{-i\omega t} \quad (4.73)$$

Răspunsul sistemului la aplicarea câmpului electric va fi curentul (partea corespunzătoare lui $\sigma^{(2)}$):

$$\vec{j}_2(\omega) = \sigma^{(2)}(\omega) \cdot \vec{E}(\omega)$$

Dependența de timp a curentului electric este:

$$\vec{j}_2(t) = -\frac{2e^2 D\tau}{(2\pi)^2 \pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^2 q}{Dq^2\tau - i\omega\tau} e^{-i\omega t} \cdot \vec{E}_0 \quad (4.74)$$

Integrala după ω este:

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \frac{e^{-i\omega t}}{Dq^2\tau - i\omega\tau}$$

Făcînd schimbarea de variabilă: $i\omega = z$, obținem:

$$I_2 = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} dz \cdot \frac{e^{-zt}}{Dq^2\tau - z\tau}$$

Polul este $z_0 = Dq^2$. Inchizînd conturul de integrare prin semiplanul drept, găsim:

$$I_2 = \frac{1}{\tau} \cdot e^{-Dq^2 t} \quad t > 0 \quad (4.75)$$

Inlocuind (4.75) în (4.74) obținem:

$$\vec{j}_2(t) = -\frac{2e^2 D}{(2\pi)^2 \pi \hbar} \int d^2 q \cdot e^{-Dq^2 t} \cdot \vec{E}_0 \quad (4.76)$$

Rezultatul ne spune că valorile esențiale pentru \vec{q} , care contribuie la curent sînt acelea pentru care $Dq^2 t \sim 1$, iar raza spotului în jurul lui $-\vec{k}$ este $q_c \sim 1/\sqrt{Dt}$. Valorile mai mari pentru q sînt neesențiale, datorită formei de tip exponențial din (4.76). Imediat, din (4.76), se observă că cîmpul electric de tip δ dă naștere unui curent electric în sens opus cîmpului, care se atenuează în timp și care este de fapt cauzat de efectul de tip "ecou".

Dezordinea în sisteme cu momente magnetice locale

Existența momentelor magnetice locale este importantă în determinarea proprietăților materialelor, chiar dacă sistemele electronice nu sînt dezordonate. Fizica momentelor locale conține două probleme cheie. Prima problemă este legată de formarea momentelor locale. Această problemă a fost discutată de Friedel (1956) și de către Anderson și Wolff (1961). A doua problemă este legată de comportamentul sistemelor cu momente locale, în limita temperaturilor scăzute. În faza metalică acest al doilea aspect este cunoscut ca problema Kondo. Pentru temperaturi mai scăzute decît o anumită temperatură T_K (numită temperatură Kondo), un electron de conducție formează o stare de singlet împreună cu un moment local, dînd naștere unui obiect compozit, care este o impuritate nemagnetică. Acesta este motivul pentru care, la $T < T_K$ și în materiale "curate", momentele locale nu există în mod efectiv. În prezența dezordinii însă, au fost constatate următoarele fapte: a) Dezordinea poate facilita formarea momentelor locale, b) Într-un anumit sens, temperatura Kondo este zero în sistemele dezordonate. Vedem în continuare problema momentelor locale în faza izolatoare. Ideile dezvoltate pentru înțelegerea comportamentului momentelor locale în sistemele electronice dezordonate au apărut odată cu studiul comportamentului momentelor locale în faza izolatoare. În mod concret, considerăm modelul unui semiconductor dopat (de ex: Si:P, CdS:In) la concentrația donoare n . Deoarece raza Bohr a este, în acest caz, mult mai mare decît constanta de rețea și considerînd integrala de schimb J , semiconductorii dopați pot fi modelați printr-un sistem de

obiecte cu spinul $1/2$, distribuite haotic în spațiu. Proprietățile magnetice ale sistemului sînt caracterizate prin hamiltonianul Heisenberg antiferomagnetic:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (4.77)$$

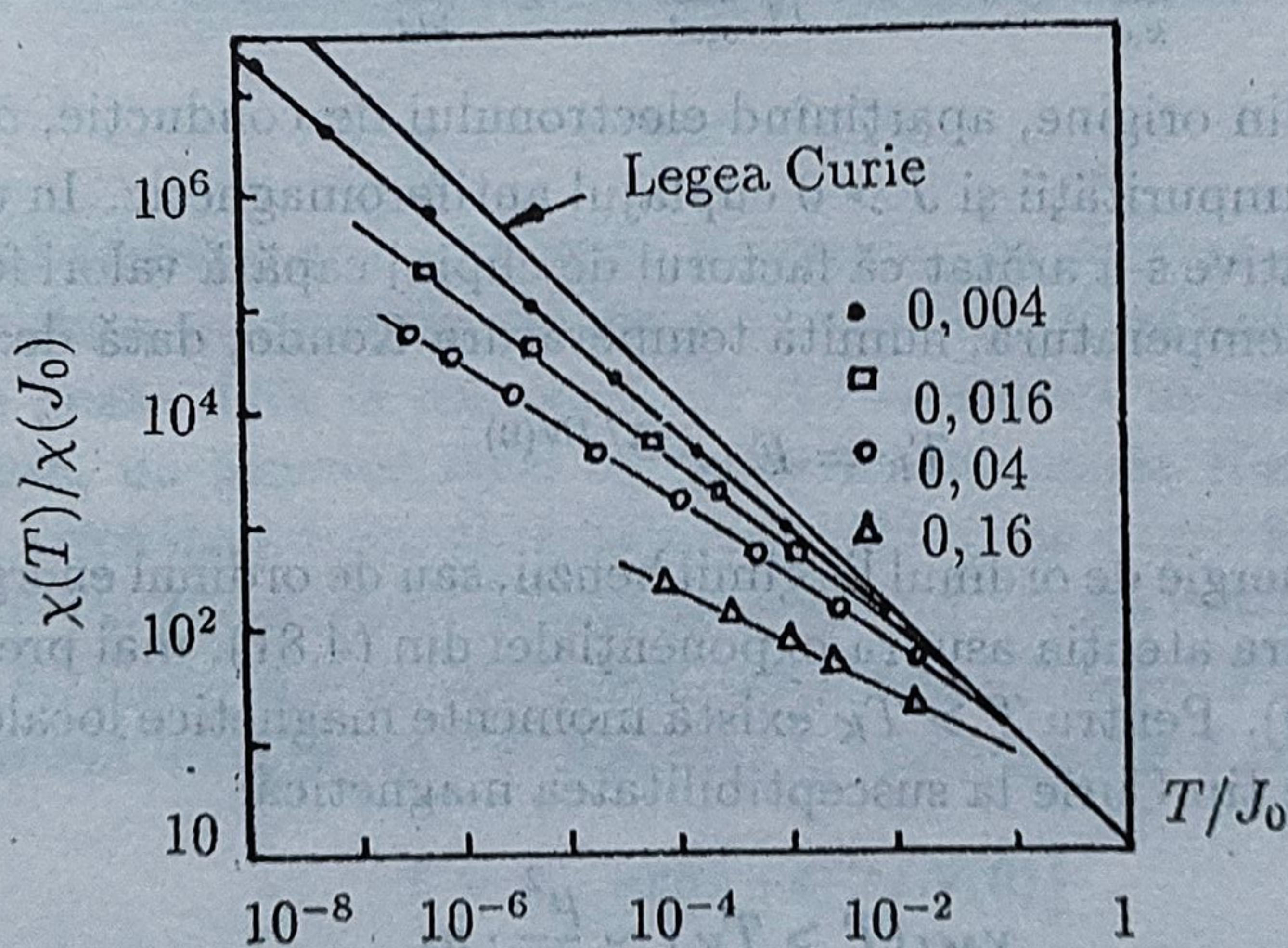
unde:

$$J(r) = J_0 e^{-2r/a} \quad (4.78)$$

$J_0 > 0$, iar $J(r)$ scade exponențial cu r . Aici ideea fizică este că pentru o anumită temperatură T , spinii conectați prin $J > T$ se vor cupla pentru a forma o stare nemagnetică (de singlet) și nu vor mai prezenta interes deosebit pentru problema studiată. Într-un anumit sens acest izolator este un analog al problemei Kondo. Pentru cazul unui sistem foarte dezordonat, la $T = J_M$, (J_M -valoarea maximă a cuplajului), susceptibilitatea magnetică are forma:

$$\chi(T = J_M) = N(J_M) \chi_c(J_M) \quad (4.79)$$

unde $\chi_c(J_M) = \mu_B^2 / J_M$ este susceptibilitatea Curie pentru un spin liber, la temperatura $T = J_M$, iar $N(J_M)$ este numărul de spini rămași liberi cînd factorul de cuplaj atinge valoarea J_M . În figură este prezentată susceptibilitatea magnetică (normată), ca funcție de temperatură. (Susceptibilitatea Curie este de asemenea reprezentată).



Susceptibilitatea magnetică a unui sistem Heisenberg 3D de spini $1/2$ dispuși haotic în spațiu și cu integrală de schimb de tip exponențial (pentru diferite concentrații).

Este important de observat că nu există nici un semn de saturație când $T \rightarrow 0$. Aceasta indică absența ordonării magnetice la T finit. Curbele sugerează o lege de tip "sub-Curie", $\chi(T \rightarrow 0) \sim T^{-\alpha}$, cu $0 < \alpha < 1$. Starea fundamentală la $T = 0$ este o stare de singlet (haotic) cu o susceptibilitate magnetică divergentă.

Problema Kondo în prezența dezordinii

În sistemele metalice "curate" și în prezența momentelor locale, interacțiunile magnetice discutate în secțiunea precedentă se consideră a fi mai puțin importante decât interacțiunea dintre momentele locale și electronii de conducție. Înainte de a vedea cazul dezordonat, vom puncta câteva chestiuni importante legate de efectul Kondo în sistemele "curate". Hamiltonianul Kondo, pentru o impuritate magnetică cu spin $1/2$ și situată în origine, este:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + J \cdot \vec{S} \cdot \vec{s}(0) = \\ &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \frac{J}{N} \sum_{\sigma,\sigma'} \vec{S} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} \sum_{kk'} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma'} \end{aligned} \quad (4.80)$$

cu $\vec{s}(0)$ spinul din origine, aparținând electronului de conducție, $\vec{\sigma}$ -matricile Pauli, \vec{S} -spinul impurității și $J > 0$ cuplajul antiferomagnetic. În urma unor calcule perturbative s-a arătat că factorul de cuplaj capătă valori foarte mari sub o anumită temperatură, numită temperatura Kondo, dată de:

$$T_K = E \cdot e^{-1/JN(0)} \quad (4.81)$$

unde E este o energie de ordinul lărgimii benzii, sau de ordinul energiei Fermi. Ne vom concentra atenția asupra exponențialei din (4.81), mai precis asupra factorului $JN(0)$. Pentru $T > T_K$ există momente magnetice locale care dau o contribuție de tip Curie la susceptibilitatea magnetică:

$$\chi_{ML}(T > T_K) \sim \frac{\mu^2}{T} \cdot n_I \quad (4.82)$$

unde μ este momentul magnetic al momentului local, iar n_I este concentrația de momente locale. Pentru $T < T_K$, factorul de cuplaj antiferomagnetic

este foarte mare, iar din punct de vedere energetic este mai favorabil ca impuritatea să rețină electronul de conducție. Se va obține atunci un obiect compozit în stare de singlet, cu proprietăți de tip nemagnetic. Considerația de ordin fizic cea mai importantă aici este că pentru $T < T_K$ momentul local este ecranat, iar pentru $T \rightarrow 0$ sistemul este un lichid Fermi obișnuit. Aici mai este de observat că interacția moment local-moment local a fost neglijată. Efectele produse de această interacție nu sînt încă elucidate. În cele ce urmează vom argumenta că un sistem dezordonat, cu momente locale, în limita $T \rightarrow 0$, **nu este un lichid Fermi**. Aceasta are consecințe asupra tranziției metal-izolator. În sistemele dezordonate există două mecanisme care pot conduce la lipsa ecranării Kondo. Vedem aici unul din aceste mecanisme (propus de Bhatt și Fisher 1992). Acest mecanism este legat de un fenomen local și de proprietățile statistice a potențialelor haotice, care sînt importante în sistemele electronice dezordonate. Considerăm un moment local situat în origine. Probabilitatea de a găsi momentul localizat într-o cavitate de rază r și izolat de restul sistemului, este:

$$P(r) \sim e^{-cr^d} \quad (4.83)$$

d -dimensionalitatea sistemului. Presupunem că cuplajul prin schimb între momentul local și sistem, distanța dintre vecinii de ordinul unu fiind r , este:

$$J(r) \sim e^{-c'r} \quad (4.84)$$

În (4.83) și (4.84) c și c' sînt niște constante. În absența lui J momentele locale vor da o susceptibilitate Curie $\chi \sim \mu^2/T$. Cuplajul cu electronii de conducție poate duce la compensarea sau ecranarea momentului local. În general însă, un moment local nu poate fi compensat Kondo dacă J este prea mic, adică dacă r din ec.(4.84) este suficient de mare. Folosind ec.(4.81) cu $J \rightarrow J(r)$ și $T_K \rightarrow T_K(r)$ putem determina o valoare critică a lui r , pe care o numim r_c , peste care nu mai avem compensare Kondo. Putem concluziona că un moment local nu va fi compensat la temperatura T , dacă $r > r_c$ cu:

$$T = E \cdot \exp \left\{ -e^{c'r_c} / N(0) \right\} \quad (4.85)$$

sau:

$$r_c \sim \ln \left(\ln \frac{E}{T} \right) \quad (4.86)$$

Concentrația de momente locale (necompensate), $n_I(T)$, este proporțională cu $P(r_c)$ dată de ec.(4.83) în care folosim (4.86):

$$n_I(r_c) = n_I(T) \sim \exp \left\{ -c'' \left[\ln \left(\ln \frac{E}{T} \right) \right]^d \right\} \quad (4.87)$$

cu c'' o constantă. Aceasta va conduce la o susceptibilitate magnetică a momentelor locale dată de:

$$\chi_{ML}(T) \sim \frac{\mu^2}{T} \cdot \exp \left\{ -c'' \left[\ln \left(\ln \frac{E}{T} \right) \right]^d \right\} \quad (4.88)$$

și la o căldură specifică dată de:

$$C_v(T) \equiv T \cdot \gamma(T) = T \cdot \frac{d}{dT} n_I(T) \quad (4.89)$$

Este clar că atât χ_{ML} cât și γ diverg cînd $T \rightarrow 0$. Concluzia este că un sistem dezordonat cu momente locale nu este un lichid Fermi, în orice dimensiune și pentru orice grad de dezordine. Să considerăm un ultim punct legat de acest model. În faza metalică, interacțiunea între momentele locale apare prin interacția de tip $RKKY$ mediată de către electronii de conducție. Interacția între spinii aflați în pozițiile \vec{R}_i și \vec{R}_j , separați de distanța R_{ij} și cuplați cu electronii de conducție prin J_i și J_j , este:

$$K_{ij} \sim \frac{J_i J_j}{|R_{ij}|^d} N(0) g_d(k_F R_i, k_F R_j) \quad (4.90)$$

cu g_d o funcție oscilantă, $|g_d| = O(1)$. Pentru momente locale avînd spinul $1/2$ interacțiile antiferomagnetice au un efect mai puternic decît cele de tip ferromagnetic. Pentru simplitate g_d din ec.(4.90) va fi înlocuit cu 1. Pentru a estima efectele ec.(4.90) considerăm două momente locale situate în cavități de dimensiune r și separate prin distanța R . Distanța R se leagă de $n_I(r)$ prin $R \sim n_I^{-1/d}$. Pentru a lega R de temperatură considerăm că cei doi spini vor forma o stare nemagnetică de singlet dacă câștigul energetic este mai mare decît T . Vom avea:

$$T \sim \frac{J^2(r)}{R^d} N(0) \quad (4.91)$$

sau:

$$n_I \sim \frac{T}{N(0) J^2(r)} \quad (4.92)$$

Ecuatiile (4.91), (4.92), (4.82) și $n_I \sim e^{-cr^d}$, conduc la următoarea expresie pentru susceptibilitatea momentelor locale în limita temperaturilor scăzute:

$$\chi_{ML}(T) \sim \frac{1}{N(0)J^2(r)} \sim \exp \left\{ c \left[\ln \left(\frac{1}{T} \right) \right]^{1/d} \right\} \quad (4.93)$$

Această expresie, împreună cu expresia pentru $\gamma(T)$ diverge mai încet decât orice putere a lui T , când $T \rightarrow 0$. Această estimare (neriguroasă) se bazează pe argumente clasice, care pot subestima singularitățile cauzate de efectele cuantice. Este de asemenea de notat că amplitudinea interacției $RKKY$ trebuie să tindă spre zero la tranziția metal-izolator. Aceasta va conduce la o singularitate în χ_{ML} , care este controlată de amplitudinea lui K_{ij} . În final, comparăm problema compensării momentelor locale, discutată mai sus, cu cazul unde am considerat o interacție de scurtă rază de acțiune între momentele locale. Vom presupune că $K_{ij} \sim |R_{ij}|^{-a}$. Repetînd argumentele de mai înainte, vom obține:

$$\chi_{ML}(T) \sim \frac{1}{T^{1-d/a}} \cdot \exp \left\{ \frac{c}{a} \left[\ln \left(\frac{1}{T} \right) \right]^{1/d} \right\} \quad (4.94)$$

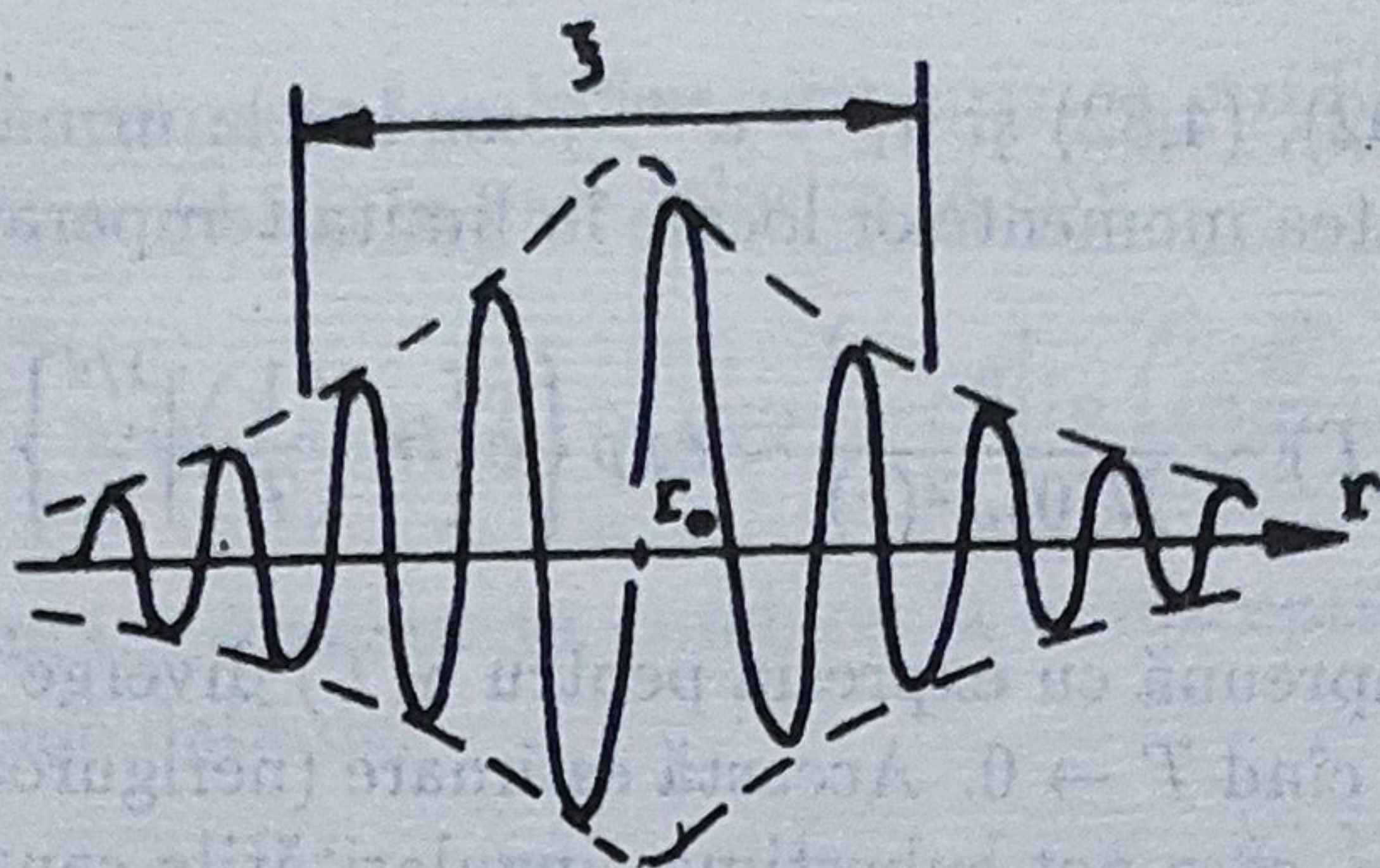
Observăm că, cazul $a = d$ este un caz marginal. Pentru interacțiuni exponențiale, mecanismul discutat nu duce la compensarea momentelor locale.

Teoria scaling a localizării

În prezența dezordinii, într-un potențial haotic, funcția de undă electronică poate fi profund modificată (față de unda Bloch), dacă dezordinea este suficient de mare (Anderson 1958). În acest caz funcția de undă poate deveni localizată, în sensul că înfășurătoarea ei descrește exponențial dintr-un anumit punct din spațiu:

$$|\psi(\vec{r})| \sim \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_0|/\xi) \quad (4.95)$$

unde ξ -este lungimea de localizare.



Să considerăm că avem de studiat problema localizării pentru o probă (hipercub) de dimensiune L^d . L este latura hipercubului, iar d dimensionalitatea. Vom nota prin G conductanța probei. Exprimînd conductanța în unități e^2/\hbar obținem conductanța adimensională:

$$g = G/(e^2/\hbar) \quad (4.96)$$

În teoria scaling a localizării încercăm să înțelegem localizarea considerînd comportarea conductanței ca funcție de dimensiunea sistemului L și a altor variabile de scală (dacă este cazul). Să considerăm un electron care se mișcă într-un mediu dezordonat. Faza funcției de undă, corespunzătoare lui, se modifică în mod haotic. Distanța pentru care ea fluctuează cu 2π definește parcursul liber mediu l . Parcursul liber mediu l este scala de lungime microscopică de interes în problema localizării. Conductanța g_0 corespunzătoare acestei scale este o măsură microscopică a dezordinii, fiind mică dacă dezordinea este mare și invers. Vom vedea în cele ce urmează că $g(L)$ are două forme asimptotice foarte diferite, pentru $L \gg l$, depinzînd de gradul de dezordine microscopică. Cînd gradul de dezordine este mic (concentrație mică de centrii de împrăștiere), funcția de undă electronică este extinsă, fiind aproape o undă de tip plan. Parcursul liber mediu l este mare în comparație cu distanțele interatomice sau cu lungimea de undă Fermi k_F^{-1} :

$$l \gg \frac{1}{k_F} \rightarrow (k_F l)^{-1} \ll 1$$

În acest caz, aplicînd teoria convențională de transport, obținem conductivitatea:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = ne^2 \frac{l}{\hbar k_F} \quad (4.97)$$

unde n -este concentrația de electroni, iar $\tau = l/v_F$ -timpul de ciocnire. Conductivitatea σ este un parametru intensiv, independent de L , atîta vreme cît sistemul este suficient de mare pentru a putea defini un parcurs liber mediu ($L \gg l$). Conductanța unei bucăți metalice mari este dată de legea lui Ohm, iar pentru un corp de forma unui hiper-cub d -dimensional este:

$$g(L) = \sigma \cdot L^{d-2} \quad (4.98)$$

Dacă stările din vecinătatea energiei Fermi ϵ_F sînt localizate, transportul în curent continuu apare datorită saltului (hopping) electronului de pe o stare ocupată pe una neocupată, dar apropiată ca energie. Stările apropiate ca energie sînt însă îndepărtate în spațiu, astfel încît elementul de matrice de salt, între aceste stări, scade exponențial, iar scala de lungime relevantă este lungimea de localizare ξ . În general ξ este mai mare decît l . În acest regim, pentru $L \gg \xi$, ne așteptăm ca:

$$g(L) \sim \exp(-L/\xi) \quad (4.99)$$

Evident (4.99) este o dependență de scală foarte ne-ohmică. Pentru o anumită dezordine în sistem, $g(L)$ evoluează, plecînd de la g_0 pe măsură ce L crește de la valoarea l , înspre una din formulele (4.98) sau (4.99). Comportarea care va fi atinsă depinde de dezordinea microscopică (g_0 la lungimea de scală l) și de dimensionalitate. Dimensionalitatea este însă cea mai semnificativă deoarece, de exemplu, în cazul unidimensional toate stările sînt localizate, lungimea de localizare ξ fiind de ordinul lui l . În acest caz singura comportare asimptotică relevantă este cea dată de ec.(4.99). Obiectivul teoriei scaling este să descrie modificarea lui $g(L)$ cu L , pentru $L > l$, și cu dimensionalitatea sistemului. Pentru a vedea acest lucru se construiește o funcție $\beta(g)$ numită funcție de scaling (Abrahams et.al 1979):

$$\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} = \frac{L}{g} \cdot \frac{dg}{dL} \quad (4.100)$$

care depinde doar de conductanța g .

Funcția de scaling

Vom discuta în continuare funcția de scaling $\beta(g)$ în diferite regimuri:

a) Conductanță mare: $g \gg g_c$

Aici g_c este o conductanță adimensională caracteristică, de ordinul π^{-2} . În acest regim legea lui Ohm este valabilă, astfel încît ec.(4.98) este valabilă. Aceasta va conduce la forma asimptotică:

$$\beta(g) = d - 2 \quad g \gg g_c \quad (4.101)$$

În două dimensiuni $\beta(g) = 0$. Aceasta reflectă faptul că g și σ au aceeași dimensiune fizică, pentru un sistem planar, sau, conductanța unui pătrat nu depinde de latura sa. Din acest motiv $d = 2$ se mai numește și dimensiune marginală.

b) Conductanță mică: $g \ll g_c$

În acest caz stările electronice sînt localizate, astfel încît $g(L)$ este descris de ec.(4.99). Atunci:

$$\beta(g) \sim \ln g \rightarrow \beta(g) = \ln \left(\frac{g}{g_c} \right) \quad (4.102)$$

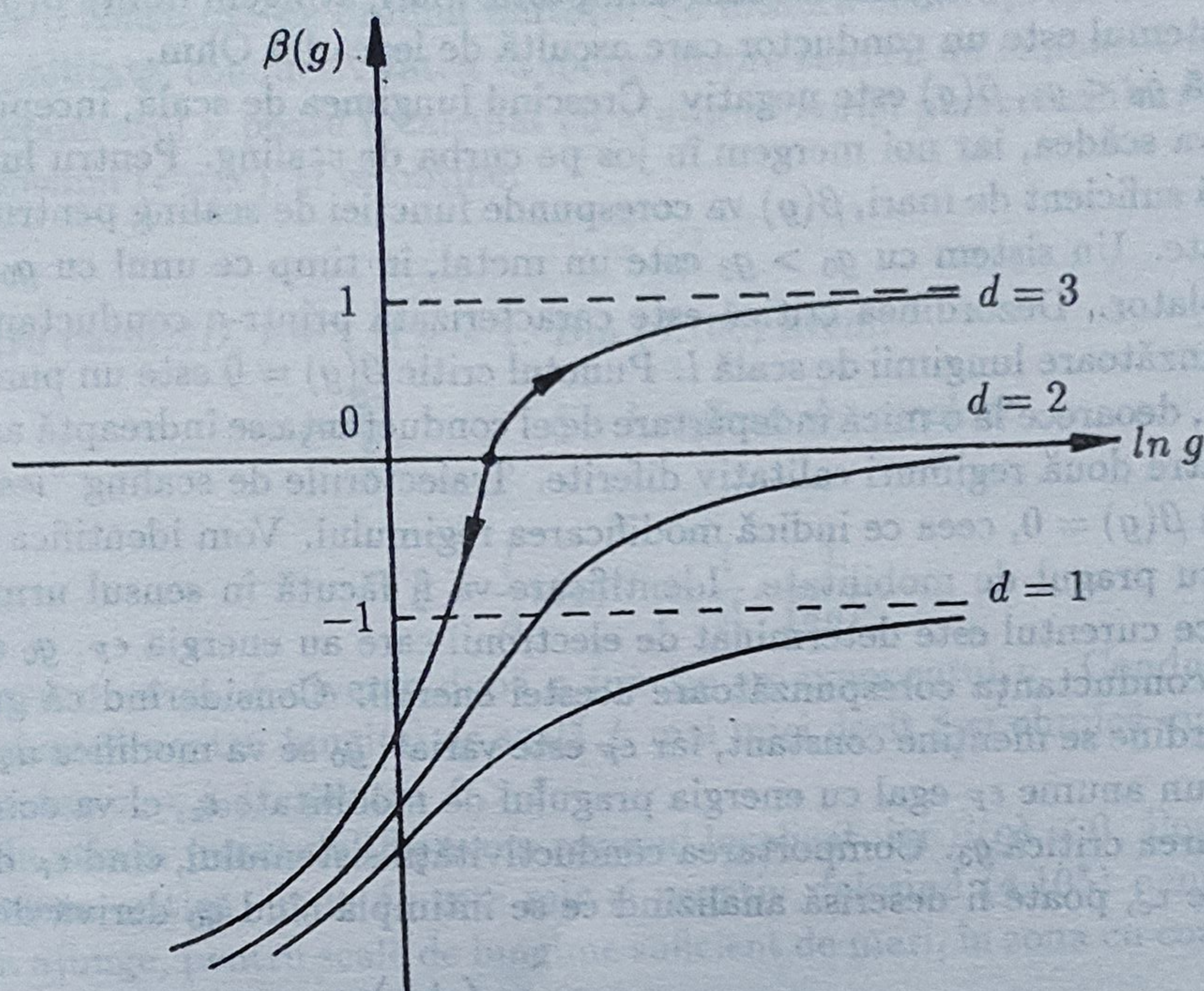
și este independent de dimensionalitate. $\beta(g)$ este negativ, corespunzînd unei descreșteri a lui g pe măsură ce L crește.

c) Regimul perturbativ:

În cazul dezordinii slabe, $1/k_F l \ll 1$, σ poate fi calculat luînd în considerare corecții la teoria de transport a lui Boltzmann. Mergînd la ordine superioare în $1/k_F l$, apar corecții seminficative la conductivitate. Ele se datorează împrăstierilor înapoi și sînt dependente de scală. Contribuția acestor termeni duce la corecții de tip g^{-1} , astfel încît pentru g mare avem:

$$\beta(g) = (d - 2) - \frac{a}{g} \quad (4.103)$$

Pentru un gaz electronic $a = g_c = \pi^{-2}$. Vedem că $\beta(g)$ este întotdeauna mai mic decît valoarea corespunzătoare legii lui Ohm (4.101), astfel încît conducția într-un sistem electronic dezordonat nu este niciodată exact de tip ohmic. Conductanța va crește întotdeauna mai încet cu dimensiunea scalei decît ne sugerează ec.(4.98). Putem construi curba de scaling folosind ec.(4.103) pentru g mare și ec.(4.102) pentru g mic, considerînd că $\beta(g)$ este o funcție continuă și monotonă. $\beta(g)$ este de așteptat să fie continuă deoarece ea descrie cum evoluează conductanța unui sistem finit ca funcție de mărimea scalei. Funcțiile de scaling $\beta(g)$ pentru $d = 3, 2$ și 1 sînt reprezentate în figură, ca funcție de conductanța g .



Implicațiile care decurg de aici, pentru conductivitatea sistemelor dezordonate la $T = 0K$ va fi discutată în continuare.

Consecințele teoriei scaling

a) Cazul tridimensional

Pornind de la g foarte mare înspre valori din ce în ce mai mici, $\beta(g)$ pornește de la valoarea 1, scade în mod continuu, devenind negativă pentru g foarte mic (în regim de localizare). Curba trebuie să treacă prin zero pentru o anumită conductanță g_3 .

Să presupunem că $g_0 > g_3$. Atunci punctul de start se află undeva pe partea pozitivă a curbei lui β . Crescând ușor lungimea scalei, începând de la l , g crește, astfel încât o să ne deplasăm în sus, puțin, pe curba $\beta(g)$. Continuând

procedeul, pentru lungimi de scală asimptotic mari, atingem limita $\beta(g) = 1$, cînd sistemul este un conductor care ascultă de legea lui Ohm.

Dacă $g_0 < g_3$, $\beta(g)$ este negativ. Crescînd lungimea de scală, începînd de la l , g va scădea, iar noi mergem în jos pe curba de scaling. Pentru lungimi de scală suficient de mari, $\beta(g)$ va corespunde funcției de scaling pentru stări localizate. Un sistem cu $g_0 > g_3$ este un metal, în timp ce unul cu $g_0 < g_3$ este izolator. Dezordinea critică este caracterizată printr-o conductanță g_3 corespunzătoare lungimii de scală l . Punctul critic $\beta(g) = 0$ este un punct fix instabil, deoarece la o mică îndepărtare de el conductanța se îndreaptă asimptotic către două regimuri calitativ diferite. Traectoriile de scaling "ies" din punctul $\beta(g) = 0$, ceea ce indică modificarea regimului. Vom identifica acest punct cu pragul de mobilitate. Identificare va fi făcută în sensul următor: Deoarece curentul este determinat de electronii care au energia ϵ_F , g_0 se referă la conductanța corespunzătoare acestei energii. Considerînd că gradul de dezordine se menține constant, iar ϵ_F este variat, g_0 se va modifica ușor, și pentru un anume ϵ_F egal cu energia pragului de mobilitate ϵ_c , el va coincide cu valoarea critică g_3 . Comportarea conductivității sistemului, cînd ϵ_F diferă puțin de ϵ_c , poate fi descrisă analizînd ce se întîmplă cînd g_0 derivă din g_3 . Avem:

$$g_0(\epsilon_F) = g_0(\epsilon_c) + (\epsilon_F - \epsilon_c) \left(\frac{dg_0}{d\epsilon_F} \right)_{\epsilon_F = \epsilon_c}$$

sau:

$$g_0 - g_3 = (\epsilon_F - \epsilon_c) g'_0 \quad (4.104)$$

unde:

$$g_0 = g_0(\epsilon_F) \quad g_3 = g_0(\epsilon_c) \quad g'_0 = \left(\frac{dg_0}{d\epsilon_F} \right)_{\epsilon_F = \epsilon_c}$$

În vecinătatea punctului fix $\beta(g) = 0$ vom presupune că $\beta(g)$ are o pantă $1/\nu$, astfel încît:

$$\beta(g) = \frac{1}{\nu} \cdot \frac{g - g_3}{g_3} = \frac{1}{\nu} \cdot \delta g \quad (4.105)$$

pentru $\delta g \ll 1$.

Considerăm pentru început cazul $\delta g > 0$. Integrînd (4.105) se obține:

$$g(L) = \sigma \cdot L$$

unde:

$$\sigma = \frac{Ag_3}{l} (\delta g)^\nu \quad (4.106)$$

A -este o constantă de ordinul unității. Pe măsură ce ne apropiem de pragul de mobilitate, conductivitatea va merge înspre zero cu un exponent universal ν . Exponentul ν poate fi calculat cu ajutorul teoriei perturbațiilor, în $2 + \epsilon$ -dimensiuni (ϵ -mic), și se obține:

$$\nu = \epsilon^{-1} \quad (4.107)$$

Pentru cazul $3D$, $\epsilon = 1$ și $\nu = 1$. Din (4.106) avem:

$$\sigma = \frac{g_3}{\xi} \quad \xi - \text{lungime de corelare} \quad (4.108)$$

și:

$$\xi = \frac{l}{A}(\delta g)^{-\nu} = \frac{l}{A} \cdot \frac{1}{(\delta g)^\nu} \quad (4.109)$$

Pentru $g \rightarrow g_3$, ξ diverge după o funcție cu exponentul ν . Conducția este ne-ohmică pentru lungimi de scală L mai mici decât ξ și ohmică cu conductivitatea $\sigma = g_3/\xi$, pentru $L > \xi$.

În stînga punctului fix avem regimul localizat, iar $\beta(g) < 0$. Pornind din regiunea critică, unde δg este mic și negativ, folosind (4.105) pentru $\beta(g)$, vom ajunge, pentru scale de lungime suficient de mari, în zona cu comportare exponențială. Aici găsim:

$$g(L) = g_3 \cdot \exp(-B|\delta g|^\nu L/l) \quad (4.110)$$

B -este o constantă de ordinul unității. Comparînd (4.110) cu (4.99) găsim că sistemul este caracterizat prin lungimea de localizare:

$$\xi_{loc} = \frac{l}{B}|\delta g|^{-\nu} \quad (4.111)$$

care diverge la pragul de mobilitate. Vedem că lungimile de corelare ξ , din zona metalică și ξ_{loc} din zona izolatoare diverg cu același exponent ν .

b) Dimensiunea $2 + \epsilon$

Funcția β descrie tranziția înspre starea localizată, în mod riguros, în $2 + \epsilon$ dimensiuni, cu $\epsilon \ll 1$. În cazul conductivității ohmice, din (4.103):

$$\beta(g) = \epsilon - \frac{a}{g} \quad (4.112)$$

Dezordinea critică ($\beta(g) = 0$) rezultă pentru:

$$g_{2+\epsilon}^* = \frac{a}{\epsilon} \quad (4.113)$$

adică pentru o conductanță mare, deoarece ϵ este mic. În regiunea critică, panta lui $\beta(g)$ este $\nu^{-1} = \epsilon$. Pe partea metalică, integrând (4.112) și folosind (4.98), obținem:

$$\sigma = \frac{A g_{2+\epsilon}^*}{l^\epsilon} (\delta g)^\mu \quad (4.114)$$

unde: $\mu = \nu\epsilon$. Introducând lungimea de corelare ξ prin:

$$\sigma = \frac{A g_{2+\epsilon}^*}{\xi^\epsilon} \quad (4.115)$$

observăm că ξ diverge ca:

$$\xi = l(\delta g)^{-\nu} \quad (4.116)$$

Extinzând acest rezultat la $d = 3$, când $\epsilon = 1$, avem $\nu = 1$.

c) Cazul bidimensional

În 2D, $\beta(g) < 0$ întotdeauna, astfel încât pentru lungimi de scală suficient de mari, este posibilă numai comportarea de tip localizat. Dacă sistemul este slab dezordonat, avînd conductanța g_0 , corespunzătoare lui l , mare, pornind din punctul $g = g_0$ de pe curba de scaling, ne vom deplasa în jos pe măsură ce lungimea scalei crește, pînă cînd vom atinge regiunea asimptotică unde $\beta(g) \sim \ln(g/g_c)$. Deci, pentru scale de lungime suficient de mari, chiar și în cazul unei dezordini slabe, stările electronice sînt localizate. Estimarea lungimii de localizare poate fi făcută dacă integrăm ec.(4.103), adică:

$$\frac{d \ln g}{d \ln L} = -\frac{a}{g} \quad (4.117)$$

între scalele de lungime l și L . Vom obține:

$$g(L) = g_0 - \frac{e^2}{h\pi^2} \cdot \ln\left(\frac{L}{l}\right) \quad (4.118)$$

unde g_0 este conductanța corespunzătoare lui l . În teoria de transport convențională:

$$g_0 = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \cdot (k_F l) \quad (4.119)$$

Conductanța $g(L)$ scade logaritmice cu L , iar această reducere dependentă de scală devine comparabilă cu conductivitatea Boltzmann pentru $L = \xi_{loc}^{(2)}$, care este:

$$\xi_{loc}^{(2)} \simeq l \cdot \exp(\hbar\pi^2 g_0 / e^2) = l \cdot \exp\left(\frac{\pi k_F l}{2}\right) \quad (4.120)$$

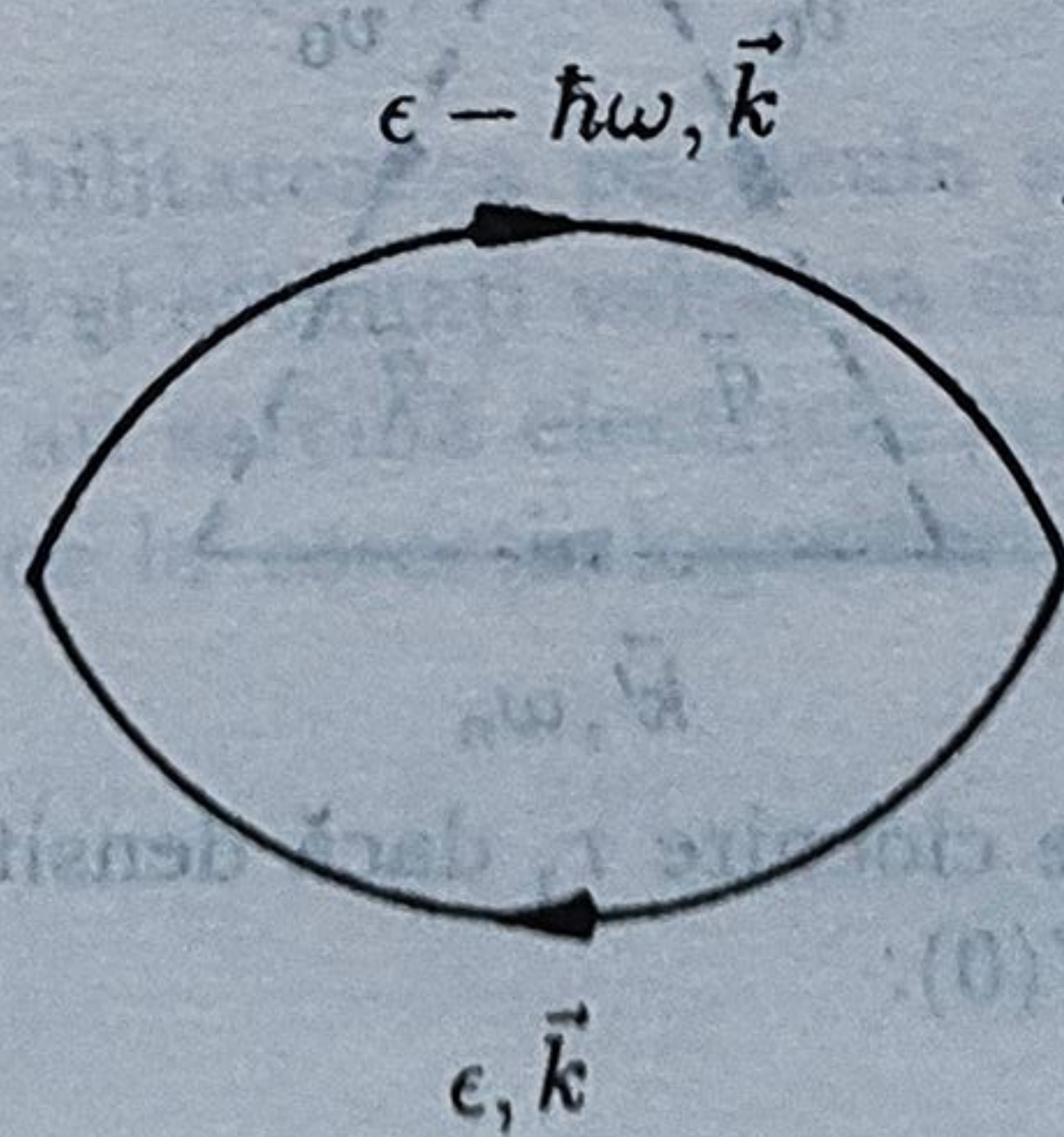
(4.120) este lungimea de localizare pentru sistemul $2D$. Ea depinde exponențial de parcursul liber mediu l . O consecință importantă a ec.(4.118) este aceea că pentru un sistem $2D$, g are o comportare ne-ohmică pentru orice lungime de scală.

d) Cazul unidimensional

În cazul $1D$, $\beta(g) < -1$ și descrește pe măsură ce conductanța descrește, astfel încât pătrundem imediat în regimul localizat. În cazul $1D$ toate stările electronice sînt localizate datorită împrăștiilor înapoi repetate, iar lungimea de localizare este de ordinul parcursului liber mediu.

Probleme

4.1 Arătați, folosind diagrama din figură:



că expresia conductivității electrice dependentă de frecvență este:

$$\sigma(\omega) = \frac{2e^2 N(0) v_F^2 \tau}{d(1 - i\omega\tau)}$$

unde, $N(0)$ este densitatea de stări electronice, v_F -viteza Fermi, τ -timpul de ciocnire, iar d -dimensionalitatea sistemului. Arătați, pentru sistemele cu $d = 3$ și $d = 2$ că expresia de mai sus se scrie:

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma}{1 - i\omega\tau}$$

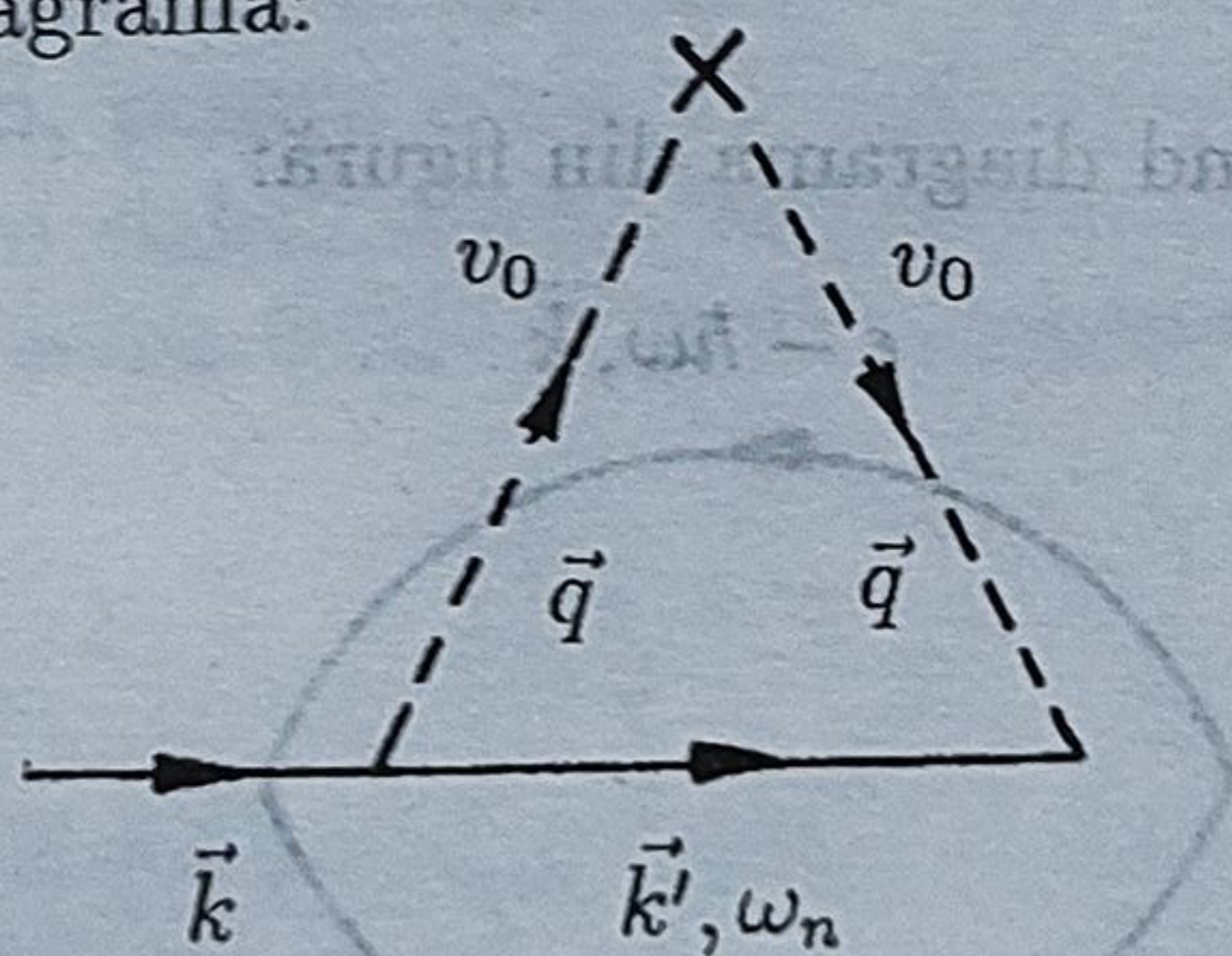
cu:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

4.2 Reevaluați expresia conductivității electrice $\sigma(\omega)$ în cazul în care densitatea de stări are forma exponențială:

$$N(\epsilon) = N_0 \cdot \exp\left[-\left|\frac{\epsilon}{t}\right|^2\right] \quad N_0 = \frac{1}{t\sqrt{\pi}} \quad \hbar = 1$$

4.3 Considerăm procesul de împrăștiere a unui electron pe impuritățile dintr-un metal. Considerînd concentrația de impurități ca fiind n_i , potențialul de împrăștiere ca avînd rază foarte scurtă de acțiune, procesul de împrăștiere fiind descris de diagrama:



să se calculeze timpul de ciocnire τ , dacă densitatea de stări electronice este constantă și egală cu $N(0)$.

4.4 Criteriul Ioffe-Regel stabilește valoarea minimă a conductivității metalice, înainte ca sistemul, în prezența dezordinii, să treacă în starea de izolator. Conform criteriului Ioffe-Regel, conductivitatea este minimă atunci când parcursul liber mediu al electronilor l este comparabil cu valoarea constantei de rețea a , ($l \simeq a$). Arătați că pentru o structură de tip cubic simplu, conductivitatea minimă este dată de:

$$\sigma_{min} \simeq \frac{1}{3} \cdot \frac{e^2}{\hbar a}$$

pentru cazul unei suprafețe Fermi sferice.

4.5 Să se arate că pentru un sistem bidimensional, dezordonat, descris de funcția de răspuns:

$$\chi_0(q, \omega) = N(0) \left[1 - \frac{\omega}{[(\omega + i/\tau)^2 - 2Dq^2/\tau]^{1/2} - i/\tau} \right]$$

unde: $N(0) = m/\pi\hbar^2$ este densitatea de stări pentru ambele orientări ale spinului, $D = v_F^2\tau/2$ -coeficientul de difuzie, τ -timpul de ciocnire, modurile plasmonice există numai pentru vectori de undă q mai mari decât o valoare critică q_c , care va fi determinată.

4.6 Probabilitatea de a găsi o particulă care difuzează, la distanța \vec{r} la momentul t , dacă ea se găsea în poziția $\vec{r} = 0$ la $t = 0$ este:

$$P(\vec{r}, t) \sim \frac{1}{(Dt)^{d/2}} \cdot e^{-|\vec{r}|^2/4Dt} \quad t \geq 0$$

a) Arătați că probabilitatea ca particula să revină în origine după un anumit timp este nenulă și estimați valoarea ei.

b) Dacă particulele au sarcină electrică, arătați, pentru $d = 2$, că comportamentul difuziv duce la corecții logaritmice în expresia conductivității electrice.

Capitolul V

SUPRACONDUCTIBILITATE ȘI DEZORDINE

Teoria BCS

Esența teoriei *BCS* (Bardeen-Cooper-Schrieffer) este legată de fenomenul de condensare Cooper, când perechile de stări electronice $k \uparrow$ și $-k \downarrow$ sînt ocupate coerent. În acest caz media $\langle c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \rangle$, care este zero în faza normală, devine finită sub temperatura critică T_c . Cel mai simplu model, care permite un astfel de comportament, este dat de hamiltonianul *BCS*, $H_0 + H_{int}$, unde:

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \quad (5.1)$$

$$H_{int} = - \sum_{k,k'} V_{kk'} c_{-k'\downarrow}^+ c_{k'\uparrow}^+ c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \quad (5.2)$$

Operatorii $c_{k\sigma}$ sînt scriși în descrierea Heisenberg, cu excepția faptului că timpul t este înlocuit cu timpul imaginar $-i\tau$:

$$c_{k\sigma}(\tau) = e^{H\tau} c_{k\sigma} e^{-H\tau} \quad (5.3)$$

Mediile termodinamice sînt reprezentate prin:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ e^{-\beta H} A \} \quad (5.4)$$

unde $Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \}$, $\beta = 1/T$, ($\hbar = k_B = 1$). Motivul introducerii timpului imaginar este legat de similaritatea între $e^{-H\tau}$ și $e^{-\beta H}$.

Definim funcția Green $G(\vec{k}, \tau)$, pentru τ în intervalul $[-\beta, \beta]$, prin:

$$G(\vec{k}, \tau) = - \langle c_{k\sigma}(\tau) c_{k\sigma}^+(0) \rangle \eta(\tau) + \langle c_{k\sigma}^+(0) c_{k\sigma}(\tau) \rangle \eta(-\tau) \quad (5.5)$$

unde $\eta(\tau)$ este funcția treaptă. Expresia (5.5) se poate scrie în forma concisă:

$$G(\vec{k}, \tau) = -\langle T_{\tau} c_{k\sigma}(\tau) c_{k\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \quad (5.6)$$

unde T_{τ} -este operatorul de ordonare Wick. El ordonează operatorii în așa fel încît τ crește de la dreapta la stînga. Ori de cîte ori, doi operatori fermionici sînt interschimbați, vom introduce factorul -1. Relația (5.6) se bucură de proprietatea de antiperiodicitate:

$$G(\vec{k}, \tau + \beta) = -G(\vec{k}, \tau) \quad (5.7)$$

Această proprietate este folosită pentru a defini G înafara intervalului $[-\beta, \beta]$, G avînd următoarea reprezentare Fourier:

$$G(\vec{x}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} G(\vec{k}, i\omega_n) \quad (5.8)$$

$$\omega_n = (2n + 1)\pi T \quad (5.9)$$

Coeficienții Fourier din (5.8) sînt:

$$G(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau \cdot e^{i\omega_n \tau} G(\vec{k}, \tau) \quad (5.10)$$

Pentru cazul unui sistem de electroni care nu interacționează (hamiltonianul este H_0), funcția Green $G_0(\vec{k}, \tau)$ se evaluează direct (v.problema 5.1), avînd:

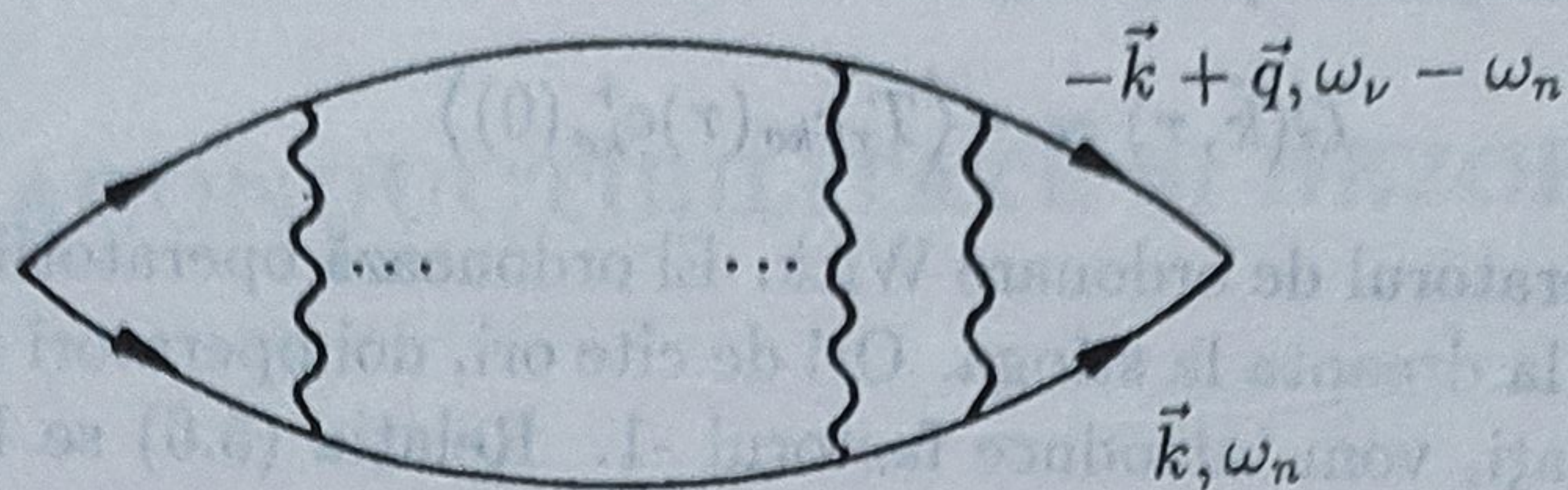
$$G_0(\vec{k}, \tau) = e^{-\epsilon_k \tau} [f_k \eta(-\tau) - (1 - f_k) \eta(\tau)] \quad (5.11)$$

unde $f_k = \langle c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \rangle_0 = (e^{\beta \epsilon_k} + 1)^{-1}$ este funcția Fermi. Folosind (5.11) în (5.10) obținem:

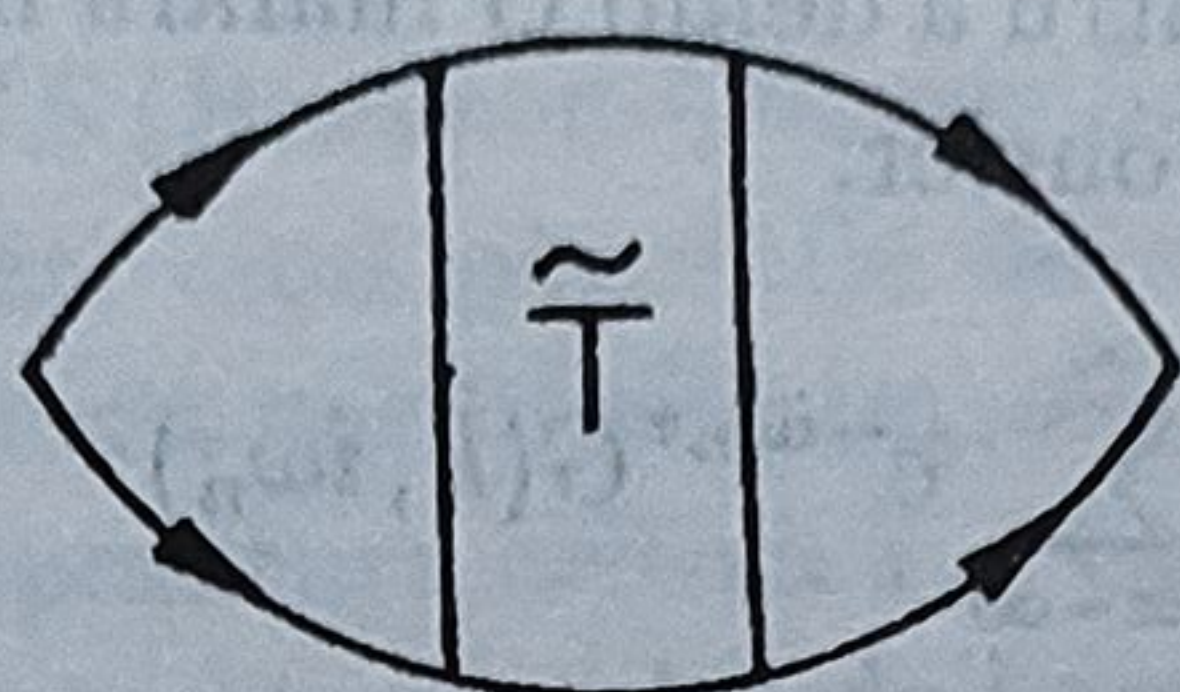
$$G_0(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k} \quad (5.12)$$

Temperatura critică. Criteriul Thouless

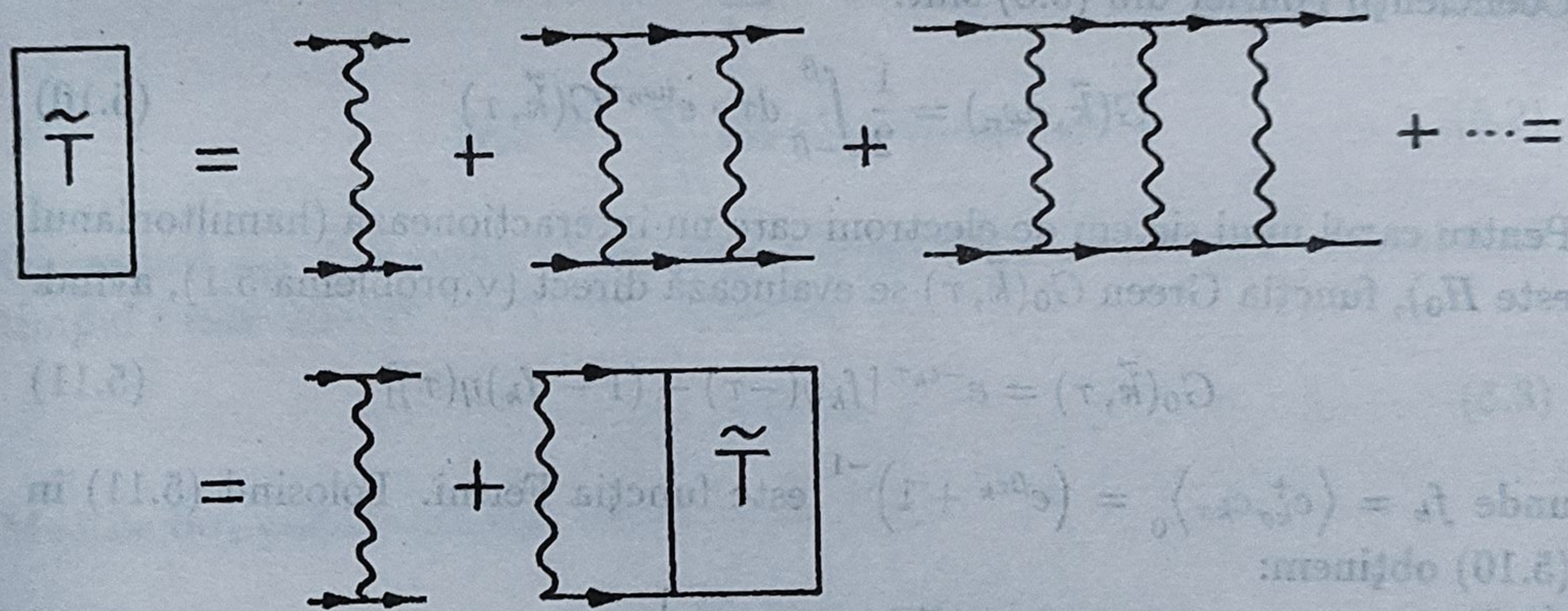
Diagrama (de tip "ladder") care conduce la instabilitatea Cooper este următoarea:



Ea reprezintă o succesiune de ciocniri repetate a perechilor de electroni și poate fi redesenată astfel:



unde \tilde{T} este dată de:



căruia îi corespunde următoarea reprezentare analitică:

$$\tilde{T} = V + VG_0G_0\tilde{T} \quad (5.13)$$

De aici:

$$\tilde{T} = \frac{V}{1 - VG_0G_0} = \frac{V}{1 - V\Pi} \quad (5.14)$$

unde $\Pi(\vec{q}, \omega_\nu)$ este dat de:

$$\Pi(\vec{q}, \omega_\nu) = \begin{array}{c} \text{--- } \vec{k} + \vec{q}, \omega_\nu - \omega_n = -\omega'_n \\ \text{--- } \vec{k}, \omega_n \end{array} =$$

$$= T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} G_0(\vec{k}, i\omega_n) G_0(-\vec{k} + \vec{q}, -i\omega'_n) \quad (5.15)$$

Temperatura critică T_c se obține din polul relației (5.14), atunci când analizăm răspunsul sistemului la un câmp static ($q \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$) (criteriul Thouless). În acest caz $\tilde{T}(q \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0)$ devine infinit. Aceasta înseamnă că sistemul de electroni devine instabil, iar sub T_c trebuie să ne așteptăm la o stare nouă. Situația este similară cu cazul materialelor feromagnetice. La temperaturi înalte acestea prezintă un răspuns finit la acțiunea unui câmp magnetic slab. Pe măsură ce temperatura scade, răspunsul, exprimat prin susceptibilitatea magnetică, crește, devenind infinit la temperatura Curie. Sub temperatura Curie materialul posedă moment magnetic spontan chiar în absența unui câmp magnetic exterior. În mod similar, ne așteptăm ca mărimile $\langle c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \rangle$, care devin infinite într-un supraconductor într-un câmp exterior mic la temperatura T_c , să fie nenule sub temperatura de tranziție T_c și în absența unui câmp exterior. Starea supraconductoare este descrisă tocmai de această caracteristică. Vom determina T_c folosind ecuația (valabilă la $T = T_c$):

$$1 - V\Pi(\vec{q} = 0, \omega_\nu = 0) \stackrel{!}{=} 0 \quad (5.16)$$

sau:

$$1 = VT_c \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} G_0(\vec{k}, i\omega_n) G_0(-\vec{k}, -i\omega_n) \quad (5.17)$$

Pentru potențialul V vom folosi următorul model:

$$V = V \cdot \eta(\omega_D - |\epsilon_k|) \quad (5.18)$$

care ne spune că electronii interacționează atractiv doar dacă au energiile situate într-un interval de grosime ω_D la suprafața Fermi (energiile fiind măsurate relativ la aceasta). Considerînd că în intervalul energetic $[-\omega_D, \omega_D]$

densitatea de stări $N(\epsilon)$ este constantă și egală cu valoarea ei la nivelul Fermi, $N(0)$, trecînd de la integrala după impulsuri la integrala după energii, (5.17) devine:

$$1 = VT_c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k} \cdot \frac{1}{-i\omega_n - \epsilon_k}$$

$$1 = VT_c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\omega_n^2 + \epsilon_k^2}$$

$$1 = VT_c \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2 \pi^2 T_c^2 + \epsilon_k^2}$$

$$1 = VT_c N(0) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\epsilon \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2 \pi^2 T_c^2 + \epsilon^2} \quad (5.19)$$

Efectuînd integrala peste energii obținem:

$$1 = N(0)V \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{2}{(2n+1)\pi} \arctan \left[\frac{\omega_D}{(2n+1)\pi T_c} \right] \quad (5.20)$$

sau:

$$1 = \frac{4N(0)V}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)} \arctan \left[\frac{\omega_D}{(2n+1)\pi T_c} \right]$$

Funcția \arctan ia valoarea $\pi/2$ cînd argumentul ei este mare și tinde la zero atunci cînd argumentul este mic. Numărul n pentru care are loc trecerea între aceste două domenii este dat de relația:

$$\frac{\omega_D}{(2n+1)\pi T_c} = 1 \rightarrow n = \frac{\omega_D}{2\pi T_c} - \frac{1}{2} \quad (5.21)$$

iar funcția \arctan va fi aproximată prin:

$$\frac{\pi}{2} \cdot \eta(\omega_D - (2n+1)\pi T_c)$$

Atunci (5.20) devine:

$$\begin{aligned} [N(0)V]^{-1} &= \sum_{n=0}^{(\omega_D/2\pi T_c)-1/2} \frac{1}{n+1/2} = \\ &= \psi\left(\frac{\omega_D}{2\pi T_c} + 1\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \simeq \ln\left(\frac{\omega_D}{2\pi T_c}\right) - \ln\left(\frac{e^{-\gamma}}{4}\right) \end{aligned} \quad (5.22)$$

Aici $\psi(x)$ este funcția digamma, iar $\gamma = 0,577$ este constanta lui Euler. În obținerea relației (5.22) am folosit formulele:

$$\sum_{n=1}^m \frac{1}{n+z} = \psi(m+1+z) - \psi(z+1)$$

$$\psi(z+1) = \psi(z) + \frac{1}{z}$$

precum și:

$$\psi\left(\frac{1}{2}\right) = -\gamma - 2\ln 2$$

împreună cu formula asimptotică (valabilă pentru $\omega_D/2\pi T_c \gg 1$):

$$\psi(z) \sim \ln z - \frac{1}{2z} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_{2n}}{2nz^{2n}}$$

Din (5.22) obținem expresia temperaturii critice T_c ca fiind:

$$T_c \simeq 1,13 \cdot \omega_D \cdot \exp\left\{-\frac{1}{N(0)V}\right\} \quad (5.23)$$

Impurități nemagnetice. Teorema Anderson

Considerăm un material supraconductor în care există impurități nemagnetice. Concentrația lor este n_i și este suficient de mică. Impuritățile sînt distribuite în mod haotic în întregul material, iar potențialul de împrăștiere este considerat de scurtă rază de acțiune, $U\delta(\vec{r})$. Ne întrebăm ce efect are prezența unei concentrații mici de impurități nemagnetice asupra temperaturii critice într-un supraconductor. Răspunsul la această întrebare este dat de **teorema Anderson**, care spune că împrăștierea pe impurități nu modifică semnificativ temperatura de tranziție supraconductoare T_c . Pentru a justifica această afirmație procedăm în felul următor: În prezența impurităților rata de împrăștiere $1/\tau$ este dată de relația (4.37):

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi n_i N(0) U^2}{\hbar}$$

n_i fiind concentrația de impurități. Modificarea energetică ΔE pentru fiecare stare din banda de conducție este dată de teoria perturbațiilor:

$$\Delta E = \int_{-\epsilon_F}^{\epsilon_F} d\epsilon \cdot \frac{n_i N(0) U^2}{E - \epsilon} \quad (5.24)$$

(aici E și ϵ sînt măsurate relativ la nivelul Fermi). Efectuînd integrala din (5.24) obținem:

$$\Delta E = n_i N(0) U^2 \ln \left| \frac{\epsilon_F + E}{\epsilon_F - E} \right| \quad (5.25)$$

care pentru $|E| \ll \epsilon_F$ devine:

$$\Delta E \simeq \frac{2n_i N(0) U^2 E}{\epsilon_F} \quad (5.26)$$

Această modificare energetică atrage după sine modificarea densității de stări la nivelul Fermi, de la valoarea $N(0)$ la o valoare ceva mai mică $N'(0)$, unde:

$$N'(0) = N(0) \left[1 + \frac{2n_i N(0) U^2}{\epsilon_F} \right]^{-1} \quad (5.27)$$

Exprimînd factorul $2n_i N(0) U^2$ în funcție de timpul de ciocnire τ , (5.27) devine:

$$N'(0) = N(0) \left[1 + \frac{\hbar}{\pi \epsilon_F \tau} \right]^{-1} \simeq N(0) \left[1 - \frac{\hbar}{\pi \epsilon_F \tau} \right] \quad (5.28)$$

Inlocuind rezultatul (5.28) în ecuația pentru temperatura critică (5.23), avem:

$$T_c \simeq 1,13 \cdot \omega_D \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{N'(0)V} \right\} \quad (5.29)$$

sau:

$$T_c \simeq 1,13 \cdot \omega_D \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\lambda [1 - \hbar / \pi \epsilon_F \tau]} \right\}$$

unde s-a introdus constanta de cuplaj adimensională $\lambda = N(0)V$. Pentru o concentrație de impurități mică (de aproximativ 1%) raportul $\hbar / \epsilon_F \tau$ este foarte mic:

$$\frac{\hbar}{\epsilon_F \tau} < 10^{-2}$$

Atunci (5.29) se va scrie:

$$\begin{aligned}
 T_c &\simeq 1,13 \cdot \omega_D \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\lambda} \left[1 + \frac{\hbar}{\pi \epsilon_F \tau} \right] \right\} = \\
 &= 1,13 \cdot \omega_D \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\lambda} \right\} \exp \left\{ -\frac{\hbar}{\lambda \pi \epsilon_F \tau} \right\} = \\
 &= T_c^{(0)} \cdot \exp \left\{ -\frac{\hbar}{\lambda \pi \epsilon_F \tau} \right\} \simeq T_c^{(0)} \left[1 - \frac{\hbar}{\lambda \pi \epsilon_F \tau} \right] \quad (5.30)
 \end{aligned}$$

unde prin $T_c^{(0)}$ s-a notat temperatura critică în absența impurităților. Privind relațiile (5.28) și (5.30) vedem că într-adevăr modificările aduse de prezența în concentrații mici a impurităților nemagnetice sînt neglijabile.

Impurități paramagnetice. Formula Abrikosov-Gorkov

Considerăm un sistem în care avem o concentrație mică de impurități. Putem avea, de exemplu, impurități nemagnetice (N) și impurități magnetice (P , pentru impurități paramagnetice). Termenii din hamiltonian corespunzători acestor impurități sînt:

$$H_N = \sum_{\mu} \sum_{kk'} \langle k' | U_N | k \rangle S_N(k' - k) c_{k'\mu}^+ c_{k\mu} \quad (5.31)$$

$$H_P = \sum_{\mu, \nu} \sum_{kk'} \langle k' | U_P | k \rangle \vec{S}_P(k' - k) \cdot (c_{k'\mu}^+ \vec{\sigma}_{\mu\nu} c_{k\nu}) \quad (5.32)$$

$$S_N(q) = \sum_a e^{-i\vec{q}\vec{r}_a} \quad (5.33)$$

$$\vec{S}_P(q) = \sum_a \vec{S}_a e^{-i\vec{q}\vec{r}_a} \quad (5.34)$$

unde \vec{r}_a este poziția impurității, \vec{S}_a -spinul impurității, $S_i(q)$ -factorii de structură corespunzători impurităților, U_i -potențialele corespunzătoare impurităților ($i = N, P$), iar μ și ν indici de spin. Impuritățile magnetice pot produce împrăstieri cu răsturnarea spinului electronilor de conducție. Factorii de structură au următoarele proprietăți:

$$\langle S_N(q) \rangle = n_N \delta_{q,0} \quad (5.35)$$

$$\langle S_N(q) S_N(-q') \rangle = n_N \delta_{qq'} + \langle S_N(q) \rangle \langle S_N(-q') \rangle \quad (5.36)$$

$$\langle \vec{S}_P(q) \rangle = 0 \quad (5.37)$$

$$\langle S_P(q)_\alpha S_P(-q')_\beta \rangle = n_P \frac{S(S+1)}{3} \delta_{\alpha\beta} \delta_{qq'} \quad (5.38)$$

unde S este valoarea corespunzătoare lui \vec{S}_a , α și β sînt componentele carteziene a lui \vec{S}_a , iar n_N și n_P concentrațiile de impurități nemagnetice și paramagnetice. În prezența impurităților paramagnetice, ecuația pentru temperatura critică, în teoria Abrikosov-Gorkov este:

$$1 = \lambda T_c \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\epsilon \frac{1}{\epsilon^2 + \omega_n^2 b^2} \quad (5.39)$$

unde:

$$b = 1 + \frac{1}{|\omega_n| \tau} \quad \tau \equiv \tau_P \quad (5.40)$$

Formula (5.39) este o consecință a faptului că funcția Green în prezența impurităților conține un termen de self-energie a cărei parte imaginară este proporțională cu $1/\tau$. Ecuația (5.39) se rescrie sub forma:

$$1 = \lambda T_c \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\epsilon \frac{1}{\epsilon^2 + \omega_n^2} + \lambda T_c R \quad (5.41)$$

unde:

$$R = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \left[\frac{1}{\epsilon^2 + \omega_n^2 b^2} - \frac{1}{\epsilon^2 + \omega_n^2} \right] d\epsilon \quad (5.42)$$

Folosind formula:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{x^2 + (2n+1)^2 \pi^2} = \frac{1}{4x} \cdot \tanh\left(\frac{x}{2}\right) \quad (5.43)$$

în prima contribuție din ec.(5.41), aceasta devine:

$$1 = \lambda \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{2\epsilon} \cdot \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T_c}\right) + \lambda T_c R \quad (5.44)$$

Pe de altă parte, ecuația pentru temperatura critică, în absența impurităților, este:

$$1 = \lambda \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{2\epsilon} \cdot \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T_c^{(0)}}\right) \quad (5.45)$$

Inlocuind (5.45) în membrul stîng al relației (5.44) avem:

$$\int_0^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \cdot \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T_c^{(0)}}\right) = \int_0^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \cdot \tanh\left(\frac{\epsilon}{2T_c}\right) + T_c R \quad (5.46)$$

Făcînd schimbările de variabile:

$$\frac{\epsilon}{2T_c^{(0)}} = x \quad \frac{\epsilon}{2T_c} = y$$

ținînd seama că:

$$\tanh\left(\frac{\omega_D}{2T_c^{(0)}}\right) \simeq \tanh\left(\frac{\omega_D}{2T_c}\right) \simeq 1$$

și:

$$\int_0^{\omega_D/2T_c^{(0)}} \frac{\ln x}{\cosh^2 x} dx \simeq \int_0^{\omega_D/2T_c} \frac{\ln x}{\cosh^2 x} dx$$

relația (5.46) se rescrie sub forma:

$$0 \simeq \ln\left(\frac{T_c^{(0)}}{T_c}\right) + T_c R \quad (5.47)$$

cu R (ținînd seama de paritate):

$$R = 4 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\omega_D} \left[\frac{1}{\epsilon^2 + \omega_n^2 b^2} - \frac{1}{\epsilon^2 + \omega_n^2} \right] d\epsilon \quad (5.48)$$

Atunci (5.47) devine:

$$\ln\left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right) = 4T_c \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\omega_D} \left[\frac{1}{\epsilon^2 + \omega_n^2 b^2} - \frac{1}{\epsilon^2 + \omega_n^2} \right] d\epsilon$$

sau:

$$\ln\left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right) = 4T_c \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\omega_n b} \arctan\left(\frac{\omega_D}{\omega_n b}\right) - \frac{1}{\omega_n} \arctan\left(\frac{\omega_D}{\omega_n}\right) \right]$$

Aproximînd, din nou, funcția $\arctan x$, obținem:

$$\ln\left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}}\right) = 2\pi T_c \sum_{n=0}^{N_c} \left[\frac{1}{\omega_n + 1/\tau} - \frac{1}{\omega_n} \right]$$

Ținînd seama că $\omega_n = (2n + 1)\pi T_c$, avem:

$$\ln \left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \right) = \sum_{n=0}^{N_c} \left[\frac{1}{n + \alpha + 1/2} - \frac{1}{n + 1/2} \right]$$

sau:

$$\ln \left(\frac{T_c^{(0)}}{T_c} \right) = \psi \left(\alpha + \frac{1}{2} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \quad (5.49)$$

unde:

$$\alpha = \frac{1}{2\pi T_c \tau} \quad (5.50)$$

Dacă, $\alpha \ll 1$, folosim aproximația:

$$\psi \left(\alpha + \frac{1}{2} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) = \frac{\pi^2 \alpha}{2} + \dots \quad (5.51)$$

Inlocuind acest rezultat în (5.49) obținem:

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \simeq 1 - \frac{\pi^2}{2} \cdot \frac{1}{2\pi T_c \tau} \simeq 1 - \frac{\pi^2}{2} \cdot \frac{1}{2\pi T_c^{(0)} \tau} \quad (5.52)$$

În limita opusă, cînd $\alpha \gg 1$:

$$\psi \left(\alpha + \frac{1}{2} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) = \ln(4e^\gamma \alpha) + \frac{1}{24\alpha^2} + \dots \quad (5.53)$$

și avem:

$$\ln \left(\frac{T_c^{(0)}}{T_c} \right) \simeq \ln(4e^\gamma \alpha) + \frac{1}{24\alpha^2} \quad (5.54)$$

Rezolvînd ecuația (5.54) în raport cu T_c , obținem formula:

$$T_c^2 = \frac{6}{\pi^2 \tau^2} \left[\frac{\pi \tau T_c^{(0)}}{2e^\gamma} - 1 \right] \quad (5.55)$$

Din (5.55) observăm că există o concentrație critică (n_c) de impurități, careia îi corespunde $\tau = \tau_c$, pentru care $T_c = 0$. Această concentrație este:

$$n_c \sim \frac{1}{\tau_c} = \frac{T_c^{(0)}}{1,13} \quad (5.56)$$

Vom exprima și formula (5.52) prin concentrația critică n_c . Pentru aceasta vom scrie în prealabil:

$$\alpha = \frac{1}{2\pi T_c \tau} = \frac{1}{2\pi T_c} \cdot \frac{\tau_c}{\tau} \cdot \frac{1}{\tau_c}$$

unde:

$$n_P \sim \frac{1}{\tau} \quad n_c \sim \frac{1}{\tau_c}$$

Atunci:

$$\alpha = 0,14 \cdot \frac{n_P}{n_c} \cdot \frac{T_c^{(0)}}{T_c} \quad (5.57)$$

Cu (5.57), (5.52) devine:

$$\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \simeq 1 - \frac{\pi^2}{2} \alpha (T_c = T_c^{(0)}) \simeq 1 - 0,69 \cdot \frac{n_P}{n_c} \quad (5.58)$$

În limita unei concentrații mici de impurități, temperatura critică scade liniar cu creșterea concentrației, în bună concordanță cu o multitudine de date experimentale.

Supraconductori cu cuplaj puternic. Ecuațiile Eliashberg

Teoria *BCS*, deși prezice o mulțime de caracteristici ale stării supraconductoare are și o serie de neajunsuri. Pentru supraconductorii clasici acestea constau în deosebiri cantitative între datele prezise de teorie și constatările experimentale, dar poate cel mai important lucru este imposibilitatea explicării corecte a caracteristicii curent-tensiune ($I - V$) supraconductoare. Alte abateri care apar sînt în valoarea raportului $2\Delta(0)/T_c$, care este 3,53 în teoria *BCS*, dar este 4,3 pentru *Pb* sau 4,6 pentru *Hg*. Saltul căldurii specifice electronice la $T = T_c$, $\Delta C/C_{en} = 1,43$ în cazul teoriei *BCS*, dar este mai mare pentru *Pb* și *Hg*. Coeficientul efectului izotopic $\alpha = 1/2$ în teoria *BCS*, dar este mai mic pentru *Pb* și *Hg*. Pentru a înțelege semnificația acestor abateri trebuie înțeleasă fizica corespunzătoare hamiltonianului *BCS*. Acesta este un hamiltonian de cuasiparticule cu o relație de dispersie modificată și cu o interacție efectivă (atractivă) electron-electron. Posibilitatea

formării corelațiilor perechi este puternic restrînsă la perechi cu spini și impulsuri opuse. În acest mod corelațiile specifice fazei supraconductoare sînt izolate și luate în considerare în mod neperturbativ. Abaterile de la teoria *BCS* pot rezulta din următoarele motive: a) Descrierea de tip cuasiparticule nu este potrivită. Acest lucru poate fi adevărat atunci cînd rata de amortizare a cuasiparticulelor devine suficient de mare. b) Considerarea unei interacțiuni biparticulă instantanee poate să nu fie reprezentarea cea mai adecvată. De fapt interacția prin intermediul fononilor este una retardată. c) Ipoteza perechilor de electroni este falsă.

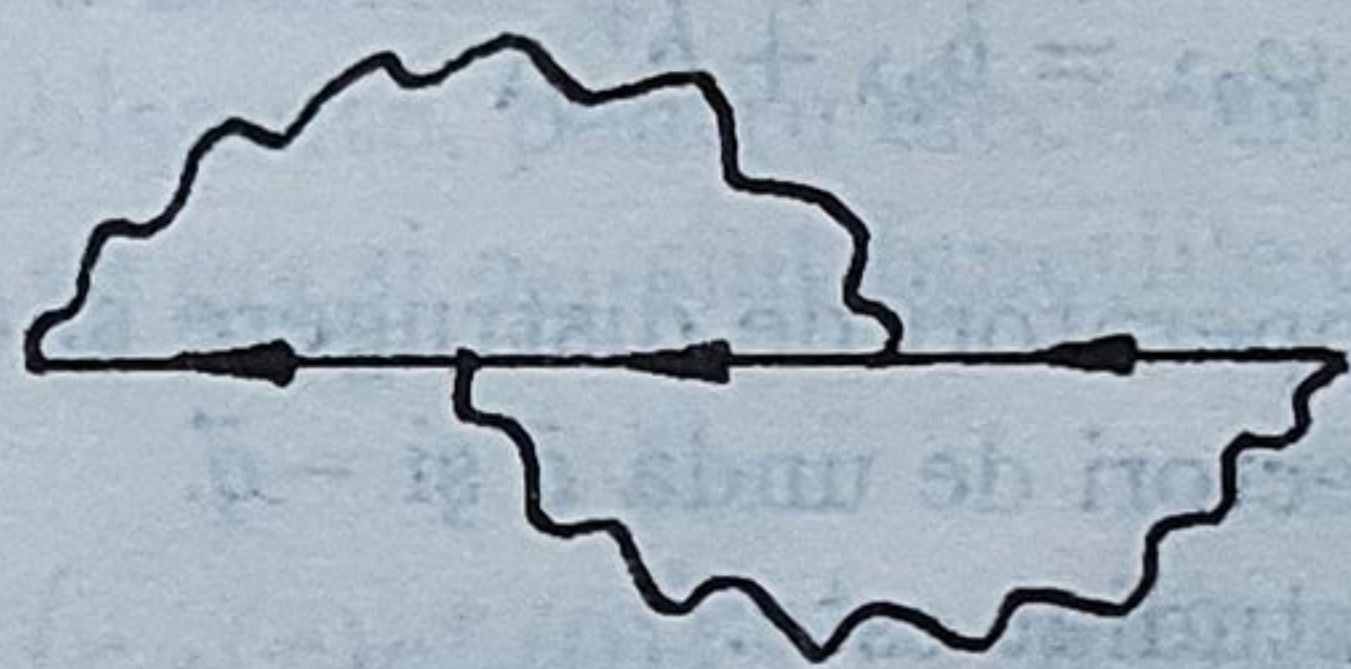
Intr-un supraconductor, interacția atractivă dintre electroni este realizată prin schimb de fononi (virtuali). Energia de transfer este atunci de ordinul ω_D . În supraconductorii cu cuplaj puternic (unde nu mai este îndeplinită condiția $\lambda = N(0)V \ll 1$), timpul de viață a unei cuasiparticule cu energia ω_D este atît de mic încît descrierea dată de teoria Landau este îndoielnică. În plus, în aceste materiale este importantă dependența în spațiu și de timp a interacției efective electron-electron (efectele de retardare sînt importante). Atunci abaterile de la teoria *BCS* cauzate de motivele a) și b) sînt foarte probabile. Cea de-a treia posibilitate nu este luată în considerare. Concordanța foarte bună dintre teorie și datele experimentale se consideră ca o justificare a posteriori a excluderii posibilității c). Deasemenea, o teorie mai completă decît varianta *BCS* trebuie să includă efectul repulsiei coulombiene și să fie extinsă și la cazurile cînd interacția electron-fonon este arbitrar de mare. Faptul că un sistem electron-electron puternic cuplat poate fi tratat relativ simplu se datorează teoremei Migdal. Migdal a studiat un sistem cuplat electron-fonon, în metale normale, și a arătat că self-energia electronică poate fi calculată perturbativ, corecțiile de vertex fiind de ordinul $\sqrt{m/M} \sim 10^{-2}$, deci neglijabile. Aici m -este masa electronică, iar M -masa ionică. Rezultatul acesta este remarcabil deoarece nu depinde de tăria cuplajului electron-fonon ci doar de existența parametrului mic $\sqrt{m/M}$:

$$\sqrt{\frac{m}{M}} \sim \frac{v_s}{v_F} \sim \frac{\omega_D}{\epsilon_F} \sim 10^{-2}$$

În teoria supraconductibilității expresia self-energiei electronice se calculează folosind formalismul Nambu. Acest formalism permite calculul contribuției stării normale și a stării condensate (supraconductoare). Folosind acest formalism, Scalapino, Schrieffer și Wilkins (*SSW*) au determinat ecuațiile pentru self-energia electronică, luînd în considerare atît interacția fononică cît

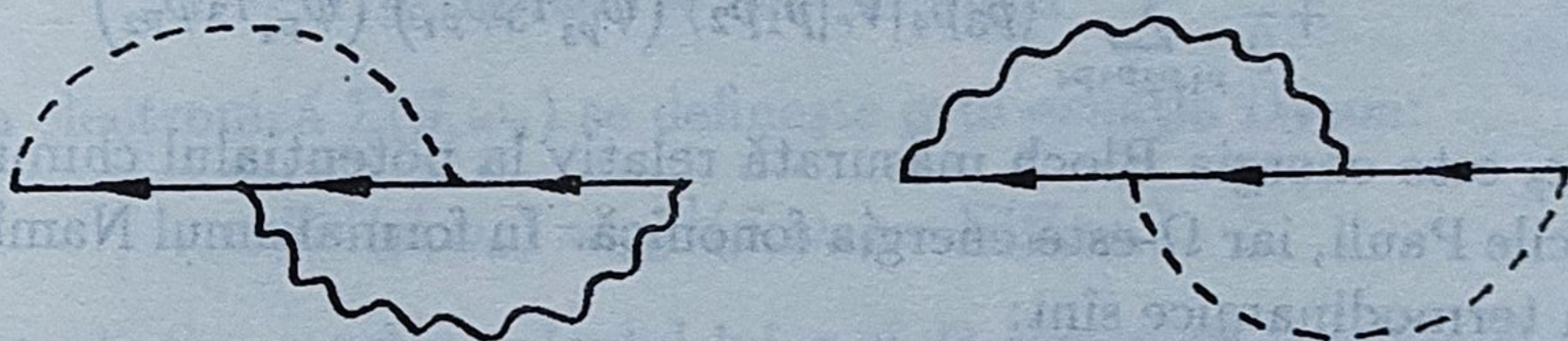
și cea coulombiană. În acest calcul este importantă structura self-energiei electronice $\Sigma(\vec{p}, \omega_n)$ pentru $p \sim p_F$ și $|\omega_n| \ll \epsilon_F$. În această zonă, interacția coulombiană duce la efecte de ecranare și renormare. Ea servește în special pentru renormarea spectrului energetic a electronilor, a fononilor, cât și pentru ecranarea interacției electron-fonon. În plus, rămîne o parte coulombiană repulsivă, de scurtă rază de acțiune, care se opune supraconductibilității. Această interacție, practic instantanee, se tratează printr-un procedeu diferit față de cel folosit în cazul interacției electron-fonon puternic retardată. Vom nota prin $V_c(\vec{p} - \vec{p}')$ interacția coulombiană ecranată și prin $g_j(\vec{p}, \vec{p}')$ elementul de matrice al interacției electron-fonon ecranată. Corecțiile de vertex care apar aici pot fi clasificate astfel:

a) Corecții fononice la vertexul electron-fonon. De exemplu:



Ele se neglijează fiind de ordinul $\sqrt{m/M} \sim 10^{-2}$.

b) Corecții coulombiene la vertexul electron-fonon. De exemplu:



Aceste corecții nu sînt simple. Cele de ordinul cel mai scăzut sînt reprezentate mai sus. Ele produc o modificare semnificativă în cuplajul electron-fonon. Totuși, aceste procese duc la factori constanți care înmulțesc pe g_j . Atunci ele vor fi absorbite în g_j , care urmează apoi să fie determinat folosind date experimentale.

c) Corecții fononice la vertexul coulombian. Ele sînt deja incluse prin luarea în considerare a corecțiilor de la punctul b).

d) Corecții coulombiene la vertexul electron-electron. Ele conduc la factori care rescalează interacția coulombiană. În aceste contribuții nu sînt

implicați fononii. Aceste corecții le vom include în V_c .

În determinarea ecuațiilor pentru self-energie folosim formalismul Nambu, introducînd operatorul de cîmp electronic cu două componente:

$$\psi_{\vec{p}} = \begin{pmatrix} c_{p\uparrow} \\ c_{-p\downarrow}^+ \end{pmatrix} \quad (5.59)$$

și adjunctul său:

$$\psi_{\vec{p}}^+ = (c_{p\uparrow}^+, c_{-p\downarrow})$$

$c_{p\uparrow}^+$ -crează un electron în starea de impuls p și cu spinul în sus, în timp ce $c_{-p\downarrow}$ -distruge un electron în starea de impuls $-p$ și cu spinul în jos.

Operatorul de cîmp fononic are forma:

$$\varphi_{q\lambda} = b_{q\lambda} + b_{-q\lambda}^+ \quad (5.60)$$

fiind o combinație liniară de operatori de distrugere și creare pentru fononii modului de vibrație λ și de vectori de undă \vec{q} și $-\vec{q}$.

Hamiltonianul sistemului studiat este:

$$H = \sum_p \epsilon_p \psi_p^+ \tau_3 \psi_p + \sum_{q\lambda} \Omega_{q\lambda} b_{q\lambda}^+ b_{q\lambda} + \sum_{pp'\lambda} g_{pp'\lambda} \varphi_{q\lambda} \psi_{p'}^+ \tau_3 \psi_p + \frac{1}{2} \sum_{p_1 p_2 p_3 p_4} \langle \vec{p}_3 \vec{p}_4 | V_c | \vec{p}_1 \vec{p}_2 \rangle (\psi_{p_3}^+ \tau_3 \psi_{p_1}) (\psi_{p_4}^+ \tau_3 \psi_{p_2}) \quad (5.61)$$

unde ϵ_p -este energia Bloch măsurată relativ la potențialul chimic, $\tau_{1,2,3}$ -sînt matricile Pauli, iar Ω -este energia fononică. În formalismul Nambu, funcțiile Green termodinamice sînt:

$$g(\vec{p}, \tau) = - \langle U T_\tau (\psi_p(\tau) \psi_p^+(0)) \rangle \quad (5.62)$$

$$D_\lambda(\vec{p}, \tau) = - \langle T_\tau (\varphi_{q\lambda}(\tau) \varphi_{q\lambda}^+(0)) \rangle \quad (5.63)$$

cu:

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} \{ e^{-\beta H} A \}}{\text{Tr} \{ e^{-\beta H} \}} \quad (5.64)$$

și:

$$\begin{aligned}\psi_p(\tau) &= e^{H\tau} \psi_p(0) e^{-H\tau} \\ \varphi_{q\lambda}(\tau) &= e^{H\tau} \varphi_{q\lambda}(0) e^{-H\tau}\end{aligned}\quad (5.65)$$

Operatorul U din (5.62) este:

$$U = 1 + R^+ + R \quad (5.66)$$

unde R^+ transformă o stare cu N particule în starea cu $N + 2$ particule, astfel încît pentru starea fundamentală avem:

$$\begin{aligned}R^+ |0, N\rangle &= |0, N + 2\rangle \\ R |0, N\rangle &= |0, N - 2\rangle\end{aligned}\quad (5.67)$$

Funcția Green g este o matrice 2×2 a cărei componente diagonale g_{11} și g_{22} sînt funcțiile Green obișnuite, pentru electronii cu spinul în sus și golurile cu spinul în jos, în timp ce g_{12} și g_{21} sînt funcțiile care descriu starea condensată cu perechi Cooper:

$$g = - \begin{pmatrix} \langle T_\tau (c_{p\uparrow}(\tau) c_{p\uparrow}^+(0)) \rangle & \langle R^+ T_\tau (c_{p\uparrow}(\tau) c_{-p\downarrow}(0)) \rangle \\ \langle R T_\tau (c_{-p\downarrow}^+(\tau) c_{p\uparrow}^+(0)) \rangle & \langle T_\tau (c_{-p\downarrow}^+(\tau) c_{-p\downarrow}(0)) \rangle \end{pmatrix} \quad (5.68)$$

Funcția Green în absența interacției este:

$$g_0^{-1}(\vec{p}, \omega_n) = i\omega_n \cdot 1 - \epsilon_p \tau_3 \quad (5.69)$$

Self-energia electronică $\Sigma(\vec{p}, \omega_n)$ se definește prin ecuația Dyson:

$$g^{-1}(\vec{p}, \omega_n) = g_0^{-1}(\vec{p}, \omega_n) - \Sigma(\vec{p}, \omega_n) \quad (5.70)$$

regulile perturbative pentru calculul lui g și D rămînînd valabile și pentru $T > 0K$. Self-energia $\Sigma(\vec{p}, \omega_n)$ se exprimă ca o combinație liniară, cu ajutorul matricilor $1, \tau_1, \tau_2$ și τ_3 :

$$\Sigma(\vec{p}, \omega_n) = [1 - Z(\vec{p}, \omega_n)] i\omega_n \cdot 1 + \varphi(\vec{p}, \omega_n) \tau_1 + \tilde{\varphi}(\vec{p}, \omega_n) \tau_2 + \chi(\vec{p}, \omega_n) \tau_3 \quad (5.71)$$

unde $Z, \varphi, \tilde{\varphi}$ și χ sînt deocamdată funcții necunoscute. Considerăm $\tilde{\varphi} = 0$ ceea ce corespunde unei anumite alegeri a fazelor. Înlocuind (5.69) și (5.71) în (5.70) găsim:

$$g(\vec{p}, \omega_n) = \frac{Z(\vec{p}, \omega_n) i\omega_n \cdot 1 + \bar{\epsilon}(\vec{p}, \omega_n) \tau_3 + \varphi(\vec{p}, \omega_n) \tau_1}{[Z(\vec{p}, \omega_n) i\omega_n]^2 - \bar{\epsilon}^2(\vec{p}, \omega_n) - \varphi^2(\vec{p}, \omega_n)} \quad (5.72)$$

Cu:

$$\bar{\epsilon}(\vec{p}, \omega_n) = \epsilon_p + \chi(\vec{p}, \omega_n)$$

Din (5.72), definind $\Delta = \varphi/Z$, găsim spectrul excitațiilor elementare (considerind $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$, $\delta \rightarrow 0^+$):

$$\omega = \sqrt{\bar{\epsilon}_1^2 + \Delta^2} \quad (5.73)$$

cu: $\bar{\epsilon}_1 = \bar{\epsilon}/Z$. Dacă $\bar{\epsilon}_1 = 0$ obținem $\omega = \Delta$, adică avem o zonă interzisă ("gap") în spectrul excitațiilor elementare.

Pentru a găsi $[1 - Z(\vec{p}, \omega_n)]$ și $\varphi(\vec{p}, \omega_n)$ folosim următoarea reprezentare diagramatică pentru self-energie:

$$\Sigma = \text{diagram with wavy line} + \text{diagram with dashed line}$$

Prima contribuție este partea corespunzătoare interacției fononice, iar cea de-a doua este contribuția coulombiană. Pentru a putea scrie expresia analitică corespunzătoare reprezentării diagramatice de mai sus folosim următoarele reguli:

$\sim g(\vec{p}, \omega_n)$
 $\sim D_j^0(\vec{q}, \omega_n) \delta_{jj'}$
 $\sim V_c(\vec{q})$
 $\sim g_j(\vec{p}, \vec{p}') \tau_3$
 $\sim \tau_3$

În acord cu aceste reguli vom avea:

$$\Sigma(\vec{p}, \omega_n) = \Sigma_{ph}(\vec{p}, \omega_n) + \Sigma_c(\vec{p}, \omega_n) \quad (5.74)$$

unde:

$$\Sigma_{ph}(\vec{p}, \omega_n) = -T \sum_{n'} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} \tau_3 g(\vec{p}', \omega_{n'}) \tau_3 \sum_j |g_j(\vec{p}, \vec{p}')|^2 D_j^0(\vec{p} - \vec{p}', \omega_n - \omega_{n'}) \quad (5.75)$$

și:

$$\Sigma_c(\vec{p}, \omega_n) = -T \sum_{n'} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} \tau_3 g(\vec{p}', \omega_{n'}) \tau_3 V_c(\vec{p} - \vec{p}') \quad (5.76)$$

Pentru a efectua suma peste frecvențe folosim reprezentarea spectrală a funcțiilor Green electronică și fononică:

$$g(\vec{p}', \omega_{n'}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot \frac{a(\vec{p}', z')}{i\omega_{n'} - z'} \quad (5.77)$$

$$a(\vec{p}', z') = (-2) \cdot \text{Im}\{g(\vec{p}', z')\} \quad (5.78)$$

cu $a(\vec{p}', z')$ -densitatea spectrală, și:

$$D_j^0(\vec{p} - \vec{p}', \omega_n - \omega_{n'}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \cdot \frac{b_j(\vec{p} - \vec{p}', z)}{i(\omega_n - \omega_{n'}) - z} \quad (5.79)$$

Atunci, pentru partea fononică, vom avea:

$$\begin{aligned} \Sigma_{ph}(\vec{p}, \omega_n) = & - \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} \sum_j |g_j(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \cdot b_j(\vec{p} - \vec{p}', z) \cdot \\ & \cdot (-2) \tau_3 \text{Im}\{g(\vec{p}', z')\} \tau_3 T \sum_{n'} \frac{1}{i\omega_{n'} - z'} \cdot \frac{1}{i(\omega_n - \omega_{n'}) - z} \end{aligned} \quad (5.80)$$

Suma după n' din expresia de mai sus este (v. Appendix):

$$T \sum_{n'} \frac{1}{i\omega_{n'} - z'} \cdot \frac{1}{i(\omega_n - \omega_{n'}) - z} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{i\omega_n - z - z'} \quad (5.81)$$

deci:

$$\Sigma_{ph}(\vec{p}, \omega) = - \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} \sum_j |g_j(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \cdot b_j(\vec{p} - \vec{p}', z) \cdot \tau_3 \text{Im}\{g(\vec{p}', z')\} \tau_3 \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{\omega - z - z' + i\delta} \quad (5.82)$$

Mai facem aproximația:

$$\chi(\vec{p}, \omega) \simeq 0 \quad (5.83)$$

Această aproximație este valabilă în general în cazul metalelor, factorul χ producînd doar o mică modificare a potențialului chimic. Atunci:

$$\bar{\epsilon}(\vec{p}, \omega_n) = \epsilon_p + \chi(\vec{p}, \omega_n) \simeq \epsilon_p$$

Mediind (5.82) la suprafața Fermi, după regula:

$$\Sigma_{ph}(\omega) = \frac{\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \Sigma_{ph}(\vec{p}, \omega)}{\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}}} \quad (5.84)$$

și folosind:

$$\int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} = \int d\epsilon \int_{S_F} \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} \quad (5.85)$$

vom avea:

$$\Sigma_{ph}(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \left(\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \right)^{-1} \int_{S_F} \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} \sum_j |g_j(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \cdot b_j(\vec{p} - \vec{p}', z) \int \tau_3 \text{Im}\{g(\vec{p}', z')\} \tau_3 d\epsilon \cdot \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{\omega - z - z' + i\delta} \quad (5.86)$$

Pentru a calcula integrala peste ϵ folosim:

$$\tau_3 g(\vec{p}', z') \tau_3 = \frac{Z(\vec{p}', z') z' \cdot 1 + \epsilon(\vec{p}', z') \tau_3 - \varphi(\vec{p}', z') \tau_1}{[Z(\vec{p}', z') z']^2 - \epsilon^2(\vec{p}', z') - \varphi^2(\vec{p}', z')} \quad (5.87)$$

(aici s-a folosit proprietatea $\tau_3 \tau_1 \tau_3 = -\tau_1$), precum și integrala:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{\epsilon^2 - A} = i \frac{\pi}{\sqrt{A}} \cdot \text{sign}\{\sqrt{A}\} \quad (5.88)$$

Vom obține:

$$\Sigma_{ph}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{4\pi} \int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \int_{S_F} \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} \sum_j |g_j(\vec{p}, \vec{p}')|^2 b_j(\vec{p} - \vec{p}', z) \cdot \left(\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \right)^{-1} \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{\omega - z - z' + i\delta} \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{Z z' \cdot 1 - \varphi \tau_1}{\sqrt{Z^2 z'^2 - \varphi^2}} \right\} \operatorname{sign}\{z'\} \quad (5.89)$$

Pe de altă parte:

$$\Sigma_{ph}(\omega) = [1 - Z_{ph}(\omega)] \omega \cdot 1 + \varphi_{ph}(\omega) \tau_1 \quad (5.90)$$

Identificînd între coeficienții matricilor 1 și τ_1 , avem pentru început:

$$[1 - Z_{ph}(\omega)] \omega = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \left[- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{4\pi} \int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \int_{S_F} \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} \sum_j |g_j(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \cdot b_j(\vec{p} - \vec{p}', z) \left(\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \right)^{-1} \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{\omega - z - z' + i\delta} \right] \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{z'}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \operatorname{sign}\{z'\} \quad (5.91)$$

unde s-a introdus: $\Delta(z') = \varphi(z')/Z(z')$. Paranteza dreaptă din (5.91) este nucleul fononic al ecuației și se notează prin $K_{ph}(z', \omega)$. El se calculează folosind:

$$b_j(\vec{p} - \vec{p}', z) \equiv b_j(\vec{q}, z) = 2\pi [\delta(z - \omega_j(\vec{q})) - \delta(z + \omega_j(\vec{q}))] \quad (5.92)$$

Integrala peste z , care apare în expresia nucleului fononic, se desparte în două contribuții, de la $-\infty$ la 0 și de la 0 la $+\infty$. Făcînd schimbarea de variabilă $z \rightarrow -z$ în contribuția de la $-\infty$ la 0 și folosind proprietățile funcției δ , vom găsi că:

$$K_{ph}(z', \omega) = \int_0^{\infty} dz \cdot \frac{1}{2} \alpha^2(z) F(z) \left\{ \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{z' + z - \omega - i\delta} - \frac{\tanh(z'/2T) - \coth(z/2T)}{z' - z - \omega - i\delta} \right\} \quad (5.93)$$

unde funcția spectrală $\alpha^2(z)F(z)$ este:

$$\alpha^2(z)F(z) = \int_{S_F} \frac{d^2p}{v_{\vec{p}}} \int_{S_F} \frac{d^2p'}{v_{\vec{p}'}} \sum_j |g_j(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \delta(z - \omega_j(\vec{q})) \left(\int_{S_F} \frac{d^2p}{v_{\vec{p}}} \right)^{-1} \quad (5.94)$$

Atunci:

$$[1 - Z_{ph}(\omega)]\omega = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot K_{ph}(z', \omega) \cdot \text{Re} \left\{ \frac{z'}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.95)$$

Din identificarea coeficienților matricilor τ_1 găsim expresia lui $\varphi_{ph}(\omega)$.
Procedînd în mod asemănător avem:

$$\varphi_{ph}(\omega) \equiv Z_{ph}(\omega)\Delta_{ph}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot K_{ph}(z', \omega) \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.96)$$

Pentru a găsi partea coulombiană pornim de la relația (5.76). Înlocuind în această relație reprezentarea spectrală pentru funcția Green electronică (5.77), (5.78) și folosind identitatea:

$$T \sum_{n'} \frac{1}{i\omega_{n'} - z'} = -\frac{1}{2} \cdot \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.97)$$

obținem:

$$\Sigma_c(\vec{p}, \omega_n) = - \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} V_c(\vec{p} - \vec{p}') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \tau_3 \text{Im}\{g(\vec{p}', z')\} \tau_3 \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.98)$$

Folosind (5.87) în (5.98) și scriind:

$$\Sigma_c = [1 - Z_c]\omega \cdot 1 + \varphi_c \tau_1 \quad (5.99)$$

observăm, pe considerente de paritate după variabila z' , că:

$$Z_c = 1 \quad (5.100)$$

și:

$$\dot{\varphi}_c(\vec{p}) = \int_0^{\infty} \frac{dz'}{\pi} \cdot \tanh \frac{z'}{2T} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} V_c(\vec{p} - \vec{p}') \text{Im} \left\{ \frac{\varphi(\vec{p}', z')}{Z^2(z')z'^2 - \epsilon_p^2 - \varphi^2(\vec{p}', z')} \right\} \quad (5.101)$$

Mediind (5.101) la suprafața Fermi, cu ajutorul formulei:

$$\varphi_c(p) = \frac{\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \varphi_c(\vec{p})}{\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}}} \quad (5.102)$$

vom avea (folosind și (5.85)):

$$\varphi_c(p) = \int_0^\infty \frac{dz'}{\pi} \cdot \tanh \frac{z'}{2T} \int d\epsilon \cdot N(0) V_c(p, p') \operatorname{Im} \left\{ \frac{\varphi(p', z')}{Z^2(z') z'^2 - \epsilon_{p'}^2 - \varphi^2(p', z')} \right\} \quad (5.103)$$

unde:

$$N(0) V_c(p, p') = \frac{\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \int_{S_F} \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} V_c(\vec{p} - \vec{p}')}{\int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}}} \quad (5.104)$$

$N(0)$ -este densitatea de stări la nivelul Fermi, iar $V_c(p, p')$ precum și $\varphi_c(p)$ și $\varphi(p', z')$ sînt funcții numai de modulul impulsului. Scara energiilor pentru interacția coulombiană este ϵ_F și introducem în plus, energia de tăiere ω_c , astfel încît:

$$\omega_D \ll \omega_c \ll \epsilon_F$$

La frecvențe $z' > \omega_c$ interacția electron-fonon nu mai este efectivă astfel încît, pentru acastă situație, vom considera:

$$Z(z') = 1$$

$$\varphi(p', z') = \varphi_c(p')$$

$$\tanh \frac{z'}{2T} \simeq 1$$

Despărțind integrala peste z' în două contribuții, corespunzătoare intervalelor $[0, \omega_c]$ și $[\omega_c, \infty)$, și scriind:

$$N(0) \int d\epsilon = \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3}$$

avem:

$$\varphi_c(p) = \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} V_c(p, p') \int_{\omega_c}^\infty \frac{dz'}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\varphi_c(p')}{z'^2 - \epsilon_{p'}^2 - \varphi_c^2(p')} \right\} +$$

$$+ \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} V_c(p, p') \int_0^{\omega_c} \frac{dz'}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\varphi(p', z')}{Z^2(z') z'^2 - \epsilon_{p'}^2 - \varphi^2(p', z')} \right\} \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.105)$$

Folosind:

$$\int_{\omega_c}^{\infty} \frac{dz'}{\pi} \cdot \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{z'^2 - E_{p'}^2 + i\delta} \right\} = -\frac{\eta(E_{p'} - \omega_c)}{2E_{p'}} \quad (5.106)$$

cu:

$$E_{p'}^2 = \epsilon_{p'}^2 + \varphi_c^2(p')$$

unde η este funcția treaptă, avem:

$$\begin{aligned} \varphi_c(p) + \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} V_c(p, p') \cdot \frac{\eta(E_{p'} - \omega_c)}{2E_{p'}} \cdot \varphi_c(p') = \\ = \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} V_c(p, p') \int_0^{\omega_c} \frac{dz'}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\varphi(p', z')}{Z^2(z') z'^2 - \epsilon_{p'}^2 - \varphi^2(p', z')} \right\} \tanh \frac{z'}{2T} \end{aligned} \quad (5.107)$$

Considerînd p și p' indici matriciali, (5.107) devine:

$$(1 + \Omega_c) \varphi_c = V \cdot F \quad (5.108)$$

cu:

$$\Omega_{pp'} = \frac{\eta(E_{p'} - \omega_c)}{2E_{p'}} \cdot V_c(p, p') \quad (5.109)$$

elementele matricii Ω_c , și:

$$F_{p'} = \int_0^{\omega_c} \frac{dz'}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\varphi(p', z')}{Z^2(z') z'^2 - \epsilon_{p'}^2 - \varphi^2(p', z')} \right\} \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.110)$$

V -este potențialul repulsiv, iar $(1 + \Omega_c)$ un operator nesar, astfel încît (5.108) devine:

$$\varphi_c = (1 + \Omega_c)^{-1} V \cdot F \equiv U_c \cdot F \quad (5.111)$$

Aici s-a introdus pseudopotențialul U_c :

$$U_c = (1 + \Omega_c)^{-1} V$$

sau:

$$U_c = V - \Omega_c U_c \quad (5.112)$$

Relația (5.112) scrisă desfășurată este:

$$U_c(p, p') = V_c(p, p') - \int \frac{d\vec{p}''}{(2\pi)^3} V_c(p, p'') \frac{\eta(E_{p''} - \omega_c)}{2E_{p''}} U_c(p'', p') \quad (5.113)$$

Scriind desfășurată și relația (5.111) avem:

$$\varphi_c(p) = \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} U_c(p, p') F_{p'}$$

sau, cu (5.110):

$$\varphi_c(p) = \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} U_c(p, p') \int_0^{\omega_c} \frac{dz'}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \frac{\varphi(z')}{Z^2(z')z'^2 - \epsilon_p^2 - \varphi^2(z')} \right\} \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.114)$$

Considerînd $U_c(p, p') \simeq U_c(p, p_F)$, trecînd de la integrala peste impulsuri la integrala peste energii și efectuînd această integrală, vom obține:

$$\varphi_c(p) = -N(0) \int_0^{\omega_c} dz' \cdot U_c(p, p_F) \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \cdot \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.115)$$

Notînd:

$$U_c N(0) \equiv U_c(p, p_F) N(0) \quad (5.116)$$

(5.115) devine:

$$\varphi_c(p) = -U_c N(0) \int_0^{\omega_c} dz' \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \cdot \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.117)$$

U_c se determină cu ajutorul relației (5.113):

$$U_c + \int \frac{d\vec{p}''}{(2\pi)^3} V_c(p, p'') \frac{\eta(E_{p''} - \omega_c)}{2E_{p''}} U_c = V(p, p')$$

Aici vom trece la integrala peste energii, vom folosi următorul model pentru $V_c(p, p')$:

$$V_c(p, p') = \begin{cases} V_c & , -\epsilon_F < \epsilon < \epsilon_F \\ 0 & , \text{în rest} \end{cases} \quad (5.118)$$

și relația:

$$E_{p''} = \sqrt{\epsilon^2 + \varphi_c^2}$$

Obținem:

$$U_c + N(0)V_c \int_{-\epsilon_F}^{\epsilon_F} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \varphi_c^2}} \cdot \eta \left(\sqrt{\epsilon^2 + \varphi_c^2} - \omega_c \right) \cdot U_c = V_c \quad (5.119)$$

Integrala din (5.119) are valoarea aproximativă $\ln(\epsilon_F/\omega_c)$, deci:

$$U_c + U_c N(0)V_c \ln \left(\frac{\epsilon_F}{\omega_c} \right) = V_c$$

de unde:

$$U_c = \frac{V_c}{1 + N(0)V_c \ln(\epsilon_F/\omega_c)} \quad (5.120)$$

deci:

$$U_c N(0) = \frac{N(0)V_c}{1 + N(0)V_c \ln(\epsilon_F/\omega_c)} \quad (5.121)$$

(5.117) și (5.121) sînt ecuațiile de bază care caracterizează partea coulombiană din setul ecuațiilor Eliashberg. Reunind contribuția fononică și cea coulombiană vom găsi setul de ecuații Eliashberg de bază pentru un supraconductor. Self-energia totală este:

$$\Sigma = \Sigma_{ph} + \Sigma_c$$

sau:

$$\begin{aligned} \Sigma &= [1 - Z_{ph}] \omega \cdot 1 + \varphi_{ph} \tau_1 + [1 - Z_c] \omega \cdot 1 + \varphi_c \tau_1 = \\ &= [1 - Z_{ph}] \omega \cdot 1 + (\varphi_{ph} + \varphi_c) \tau_1 = [1 - Z] \omega \cdot 1 + \varphi \tau_1 \end{aligned} \quad (5.122)$$

unde:

$$[1 - Z(\omega)] \omega = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot K_{ph}(z', \omega) \cdot \text{Re} \left\{ \frac{z'}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.123)$$

$$\varphi(\omega) \equiv Z(\omega)\Delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot K_{ph}(z', \omega) \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} -$$

și relația:

$$E_{p''} = \sqrt{\epsilon^2 + \varphi_c^2}$$

Obținem:

$$U_c + N(0)V_c \int_{-\epsilon_F}^{\epsilon_F} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \varphi_c^2}} \cdot \eta \left(\sqrt{\epsilon^2 + \varphi_c^2} - \omega_c \right) \cdot U_c = V_c \quad (5.119)$$

Integrala din (5.119) are valoarea aproximativă $\ln(\epsilon_F/\omega_c)$, deci:

$$U_c + U_c N(0)V_c \ln \left(\frac{\epsilon_F}{\omega_c} \right) = V_c$$

de unde:

$$U_c = \frac{V_c}{1 + N(0)V_c \ln(\epsilon_F/\omega_c)} \quad (5.120)$$

deci:

$$U_c N(0) = \frac{N(0)V_c}{1 + N(0)V_c \ln(\epsilon_F/\omega_c)} \quad (5.121)$$

(5.117) și (5.121) sînt ecuațiile de bază care caracterizează partea coulombiană din setul ecuațiilor Eliashberg. Reunind contribuția fononică și cea coulombiană vom găsi setul de ecuații Eliashberg de bază pentru un supraconductor. Self-energia totală este:

$$\Sigma = \Sigma_{ph} + \Sigma_c$$

sau:

$$\begin{aligned} \Sigma &= [1 - Z_{ph}] \omega \cdot 1 + \varphi_{ph} \tau_1 + [1 - Z_c] \omega \cdot 1 + \varphi_c \tau_1 = \\ &= [1 - Z_{ph}] \omega \cdot 1 + (\varphi_{ph} + \varphi_c) \tau_1 = [1 - Z] \omega \cdot 1 + \varphi \tau_1 \end{aligned} \quad (5.122)$$

unde:

$$[1 - Z(\omega)] \omega = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot K_{ph}(z', \omega) \cdot \text{Re} \left\{ \frac{z'}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.123)$$

$$\varphi(\omega) \equiv Z(\omega) \Delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot K_{ph}(z', \omega) \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} -$$

$$-U_c N(0) \int_0^{\omega_c} dz' \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \cdot \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.124)$$

cu $K_{ph}(z', \omega)$ dat de ec.(5.93). Relațiile (5.123) și (5.124) se rescriu, cu variabila z' în intervalul de la 0 la ∞ , astfel:

$$\begin{aligned} [1 - Z(\omega)] \omega = & \frac{1}{2} \int_0^\infty dz' \int_0^\infty dz \cdot \alpha^2(z) F(z) \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{z'}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \cdot \\ & \cdot \left[\left(\tanh \frac{z'}{2T} + \coth \frac{z}{2T} \right) \left(\frac{1}{z' + z + \omega + i\delta} - \frac{1}{z' + z - \omega - i\delta} \right) - \right. \\ & \left. - \left(\tanh \frac{z'}{2T} - \coth \frac{z}{2T} \right) \left(\frac{1}{z' - z + \omega + i\delta} - \frac{1}{z' - z - \omega - i\delta} \right) \right] \quad (5.125) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Z(\omega) \Delta(\omega) = & \frac{1}{2} \int_0^\infty dz' \int_0^\infty dz \cdot \alpha^2(z) F(z) \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \cdot \\ & \cdot \left[\left(\tanh \frac{z'}{2T} + \coth \frac{z}{2T} \right) \left(\frac{1}{z' + z + \omega + i\delta} + \frac{1}{z' + z - \omega - i\delta} \right) - \right. \\ & \left. - \left(\tanh \frac{z'}{2T} - \coth \frac{z}{2T} \right) \left(\frac{1}{z' - z + \omega + i\delta} + \frac{1}{z' - z - \omega - i\delta} \right) \right] - \\ & - U_c N(0) \int_0^{\omega_c} dz' \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \cdot \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.126) \end{aligned}$$

Ecuațiile (5.125) și (5.126), în forma liniarizată, permit calculul temperaturii critice T_c . Pentru aceasta scriem în prealabil cele două relații sub forma liniarizată:

$$\begin{aligned} [1 - Z(\omega)] \omega = & \frac{1}{2} \int_0^\infty dz' \int_0^\infty dz \cdot \alpha^2(z) F(z) \cdot \\ & \cdot \left[\left(\tanh \frac{z'}{2T} + \coth \frac{z}{2T} \right) \left(\frac{1}{z' + z + \omega} - \frac{1}{z' + z - \omega} \right) - \right. \end{aligned}$$

$$- \left(\tanh \frac{z'}{2T} - \coth \frac{z}{2T} \right) \left(\frac{1}{z' - z + \omega} - \frac{1}{z' - z - \omega} \right) \Bigg] \quad (5.127)$$

$$\begin{aligned} Z(\omega)\Delta(\omega) = & \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{dz'}{z'} \cdot \operatorname{Re}\{\Delta(z')\} \int_0^\infty dz \cdot \alpha^2(z) F(z) \cdot \\ & \cdot \left[\left(\tanh \frac{z'}{2T} + \coth \frac{z}{2T} \right) \left(\frac{1}{z' + z + \omega} + \frac{1}{z' + z - \omega} \right) - \right. \\ & \left. - \left(\tanh \frac{z'}{2T} - \coth \frac{z}{2T} \right) \left(\frac{1}{z' - z + \omega} + \frac{1}{z' - z - \omega} \right) \right] - \\ & - U_c N(0) \int_0^{\omega_c} \frac{dz'}{z'} \cdot \operatorname{Re}\{\Delta(z')\} \cdot \tanh \frac{z'}{2T} \end{aligned} \quad (5.128)$$

Pentru $\Delta(z')$ vom considera următorul model:

$$\Delta(z') = \begin{cases} \Delta_0 & , 0 < z' < \omega_D \\ \Delta_\infty & , z' > \omega_D \end{cases} \quad (5.129)$$

vom neglija fononii termici (ceea ce este echivalent cu condiția $\coth(z/2T) = 1$) și vom considera limita maximă a frecvenței fononice ca fiind ω_D (deci integrala după z va fi considerată pe intervalul $[0, \omega_D]$). Din (5.128), pentru $\omega \rightarrow 0$ și $T \rightarrow T_c$, avem:

$$\begin{aligned} Z(0)\Delta(0) = & \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{dz'}{z'} \cdot \operatorname{Re}\{\Delta(z')\} \int_0^{\omega_D} dz \cdot \alpha^2(z) F(z) \cdot \\ & \cdot \left[\left(\tanh \frac{z'}{2T_c} + 1 \right) \cdot \frac{2}{z' + z} + \left(\tanh \frac{z'}{2T_c} - 1 \right) \cdot \frac{2}{-z' + z} \right] - \\ & - U_c N(0) \int_0^{\omega_c} \frac{dz'}{z'} \cdot \operatorname{Re}\{\Delta(z')\} \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \end{aligned}$$

Folosind în această relație modelul (5.129), obținem:

$$\begin{aligned} Z(0)\Delta(0) = & \Delta_0 \lambda \cdot \ln \left(\frac{1,13\omega_D}{T_c} \right) + \Delta_\infty \int_{\omega_D}^\infty \frac{dz'}{z'} \cdot 2 \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z' + z} \cdot \alpha^2(z) F(z) - \\ & - U_c N(0) \Delta_0 \ln \left(\frac{1,13\omega_D}{T_c} \right) - U_c N(0) \Delta_\infty \ln \frac{\omega_c}{\omega_D} \end{aligned} \quad (5.130)$$

cu factorul de cuplaj adimensional λ dat de:

$$\lambda = 2 \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z} \cdot \alpha^2(z) F(z) \quad (5.131)$$

În obținerea relației (5.130) s-a mai folosit:

$$\int_0^{\omega_D} \frac{dz'}{z'} \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} = \ln \left(\frac{1,13\omega_D}{T_c} \right)$$

Integralele din (5.130) se aproximează astfel:

$$\begin{aligned} \int_{\omega_D}^{\infty} \frac{dz'}{z'} \cdot 2 \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z' + z} \cdot \alpha^2(z) F(z) &\simeq \int_{\omega_D}^{\infty} \frac{dz'}{z'} \cdot 2 \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z'} \cdot \alpha^2(z) F(z) \simeq \\ &\simeq \int_{\omega_D}^{\infty} \frac{dz'}{z'^2} \cdot 2 \int_0^{\omega_D} dz \alpha^2(z) F(z) \cdot \langle \omega \rangle = \frac{\lambda \langle \omega \rangle}{\omega_D} \end{aligned} \quad (5.132)$$

unde $\langle \omega \rangle$ este o frecvență fononică medie, de ordinul $0,5\omega_D$. Ținând seama că $\Delta(0) \equiv \Delta_0$, cu (5.132), (5.130) devine:

$$\begin{aligned} Z(0)\Delta_0 &= \Delta_0 \lambda \cdot \ln \left(\frac{1,13\omega_D}{T_c} \right) + \Delta_{\infty} \frac{\lambda \langle \omega \rangle}{\omega_D} - U_c N(0) \Delta_0 \ln \left(\frac{1,13\omega_D}{T_c} \right) - \\ &\quad - U_c N(0) \Delta_{\infty} \ln \frac{\omega_c}{\omega_D} \end{aligned} \quad (5.133)$$

Pentru a determina T_c trebuie găsiți $Z(0)$ și Δ_{∞} . Din (5.128), pentru $\omega \rightarrow \infty$ și $T \rightarrow T_c$ avem:

$$Z(\infty)\Delta_{\infty} = -U_c N(0) \Delta_0 \ln \left(\frac{1,13\omega_D}{T_c} \right) - U_c N(0) \Delta_{\infty} \ln \frac{\omega_c}{\omega_D} \quad (5.134)$$

Din (5.127) obținem imediat:

$$Z(\infty) = 1 \quad (5.135)$$

astfel încît, din (5.134) găsim Δ_{∞} :

$$\begin{aligned} \Delta_{\infty} &= -\frac{N(0)U_c}{1 + N(0)U_c \ln(\omega_c/\omega_D)} \cdot \Delta_0 \ln \left(\frac{1,13\omega_D}{T_c} \right) \equiv \\ &\equiv -\mu^* \Delta_0 \ln \left(\frac{1,13\omega_D}{T_c} \right) \end{aligned} \quad (5.136)$$

unde s-a introdus pseudopotentialul coulombian μ^* prin:

$$\mu^* = \frac{N(0)U_c}{1 + N(0)U_c \ln(\omega_c/\omega_D)} \quad (5.137)$$

Ținînd seama de (5.120), rescriem (5.137) sub forma echivalentă:

$$\mu^* = \frac{N(0)V_c}{1 + N(0)V_c \ln(\epsilon_F/\omega_D)} \quad (5.138)$$

Relația (5.138) este cea mai potrivită pentru a vedea semnificația fizică a pseudopotentialului coulombian. Se observă că el este redus datorită prezenței numitorului. Această reducere rezultă din diferența dintre scările de energie pentru repulsia coulombiană ($\sim \epsilon_F$) și atracția fononică ($\sim \omega_D$). De fapt, valoarea mai redusă a repulsiei coulombiene este legată de distanța medie dintre electronii perechii Cooper. Ea este de ordinul $\xi \sim \hbar v_F/\Delta_0 \sim 10^2 - 10^3 \text{ \AA}$, deci mult mai mare decât constanta de rețea $a \sim 10^0 \text{ \AA}$, pentru care avem o repulsie coulombiană de ordinul e^2/a .

$Z(0)$ se găsește din relația (5.127), pentru temperaturi foarte scăzute (cînd $\tanh(z'/2T) \simeq 1$). În acest caz (5.127) se reduce la:

$$Z(\omega) - 1 = \int_0^\infty dz' \int_0^{\omega_D} dz \cdot \alpha^2(z) F(z) \cdot \frac{2}{(z' + z)^2 - \omega^2} \quad (5.139)$$

În limita $\omega \rightarrow 0$ obținem:

$$Z(0) = 1 + \lambda \quad (5.140)$$

Folosind (5.136) și (5.140) în (5.133) obținem pentru temperatura critică T_c următoarea formulă:

$$T_c = 1,13 \cdot \omega_D \cdot \exp \left\{ -\frac{1 + \lambda}{\lambda - \mu^* \left(1 + \frac{\lambda(\omega)}{\omega_D}\right)} \right\} \quad (5.141)$$

Comparînd acest rezultat cu cel dat de teoria BCS, (5.23), observăm corecțiile (de cuplaj puternic, prin funcția de renormare $Z(0) = 1 + \lambda$, și de repulsie coulombiană, introdusă prin pseudopotentialul μ^*) la expresia temperaturii critice T_c .

Cuplajul electron difuziv-fonon

În prezența impurităților, în principiu, valoarea factorului de cuplaj λ poate fi afectată. Această modificare este legată de efectul impurităților asupra funcției spectrale $\alpha^2(z)F(z)$, care apare în expresia factorului de cuplaj (5.131). Funcția spectrală va fi scrisă sub forma:

$$\alpha^2(z)F(z) = \alpha^2(z)F_L(z) + 2\alpha^2(z)F_T(z) \quad (5.142)$$

unde indicii L și T se referă la fononii longitudinali, respectiv transversali. Expresiile pentru componentele longitudinală și transversală a funcției spectrale sînt:

$$\alpha^2(z)F_b(z) = \frac{6N(0)d_b}{\pi k_F^2 l} \int_0^\infty dq \cdot b_b(q, z) \cdot f_b(q) \quad (5.143)$$

unde $b = L, T$, l -este parcursul liber mediu electronic, $b_b(q, z)$ -este funcția spectrală fononică, iar d_b și f_b sînt date de:

$$d_L = (v_T/v_L)d_T = k_F^3/3m\sqrt{\rho_{ion}}v_L \quad (5.144)$$

$$f_L(x) = \frac{1}{3} \cdot \frac{x^2 \arctan x}{x - \arctan x} - 1 \quad (5.145)$$

$$f_T(x) = \frac{1}{2x^3} [2x^3 + 3x - 3(x^2 + 1) \arctan x] \quad (5.146)$$

Aici v_T și v_L sînt vitezele undelor transversale și longitudinale, iar ρ_{ion} este densitatea de masă ionică.

Influența dezordinii asupra temperaturii critice T_c va fi dată prin intermediul factorului de cuplaj:

$$\lambda = 2 \int \frac{dz}{z} \alpha^2(z)F(z)$$

Problema care se pune aici este dacă această corecție este sau nu semnificativă. S-a arătat (Schmid (1973)) că corecția de vertex difuzivă, pentru interacția electron-fonon, este nesemnificativă. Motivul fizic al absenței creșterii corecției difuzive este următorul: Dacă ionii rețelei oscilează (sub influența temperaturii), electronii vor urmări, practic coerent, această mișcare, deoarece în sistem tendința este de a se menține neutralitatea electrică.

Keck și Schmid (1975, 1976) au evaluat $T_c(l)$ pentru modelul Debye și au găsit o descreștere a cuplajului cu fononii longitudinali, care este însă contracarată de o creștere a cuplajului cu fononii transversali. Efectul net este o creștere a lui T_c , liniară în $1/k_F l$. Acest rezultat este valabil atît timp cît nu se consideră repulsia coulombiană. Repulsia coulombiană însă este și ea afectată de dezordine. Dacă efectul este o creștere semnificativă a repulsiei cu dezordinea, vom obține (per total) o scădere a lui T_c cu creșterea concentrației de impurități.

Interacția coulombiană în prezența dezordinii

Intr-un sistem multielectronic, potențialul coulombian:

$$v_c(q) = \left(\frac{2}{q}\right)^{d-1} \pi e^2 \quad d = 2, 3 \quad (5.147)$$

(d -este dimensionalitatea sistemului, iar $\epsilon_0 = 1$) este ecranat, prin funcția dielectrică $\epsilon(q, \omega)$. Potențialul coulombian ecranat $V_c(q, \omega)$ este dat de relația:

$$V_c(q, \omega) = \frac{v_c(q)}{\epsilon(q, \omega)} \quad (5.148)$$

În aproximația *RPA* funcția dielectrică $\epsilon(q, \omega)$ este exprimată prin funcția de răspuns densitate:

$$\epsilon(q, \omega) = 1 + v_c(q) \chi(q, \omega) \quad (5.149)$$

Pentru cazul răspunsului difuziv, $\chi(q, \omega)$ a fost calculată (v.ec.(1.79)) avînd:

$$\chi(q, \omega) = \chi(q) \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2} \equiv \chi_0 \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2} \quad (5.150)$$

în domeniul lungimilor de undă mari și la frecvențe mici. Înlocuind (5.150) și (5.147) în (5.149) iar apoi acest rezultat în (5.148) vom găsi că:

$$V_c = \frac{2\pi e^2}{q} \cdot \frac{-i\omega + Dq^2}{-i\omega + Dq^2 + Dk_2 q} \quad (5.151)$$

în cazul sistemelor bidimensionale ($d = 2$). În (5.151), k_2 este vectorul de undă de ecranare, exprimat prin relația ($\hbar = 1$):

$$k_2 = 2\pi e^2 \chi_0 \equiv 2\pi e^2 \cdot 2N(0) = 2\pi e^2 \cdot 2 \frac{m}{2\pi} = 2me^2 \quad (5.152)$$

În cazul sistemelor tridimensionale ($d = 3$), potențialul coulombian ecranat este:

$$V_c(q, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \cdot \frac{-i\omega + Dq^2}{-i\omega + Dq^2 + Dk_3^2} \quad (5.153)$$

unde vectorul de undă de ecranare este:

$$k_3^2 = 4\pi e^2 \chi_0 = 4\pi e^2 \cdot 2N(0) = 4\pi e^2 \cdot 2 \frac{mk_F}{2\pi^2} = \frac{4e^2 mk_F}{\pi} \quad (5.154)$$

Dacă studiem un supraconductor în cuplaj puternic și în prezența dezordinii, trebuie să reevaluăm expresia pseudopotențialului coulombian μ^* . Această reevaluare a fost făcută de către Anderson et al. (1983), care au obținut un pseudopotențial generalizat $\tilde{\mu}^*$ de forma:

$$\tilde{\mu}^* = \frac{\mu'}{1 + \mu' \ln(\epsilon_F / \omega_D) - (\mu' - \mu) \ln(\epsilon_F \tau \sqrt{\alpha})} \quad (5.155)$$

unde:

$$\mu' = \mu \left[1 + \left(\frac{9\pi}{4k_F^2 l^2} \right) \ln \alpha \right] \quad \mu = N(0) V_c \quad (5.156)$$

iar:

$$\alpha = \left(\frac{\rho}{\rho_c} \right)^3 \quad (5.157)$$

ρ -este rezistivitatea reziduală, iar ρ_c este rezistivitatea corespunzătoare tranziției la starea de izolator. Pentru sisteme aflate în apropierea punctului de tranziție spre starea de izolator $\tilde{\mu}^*$ este mare, iar valoarea temperaturii critice T_c va fi mult diminuată. Bulaevskii și Sadovskii (1985) au analizat de asemenea problema scăderii temperaturii critice a unui supraconductor în prezența dezordinii, luînd în considerare efectele ei asupra nucleului coulombian din ecuațiile Eliashberg. În cazul prezenței dezordinii, nucleul coulombian a fost scris sub forma următoare:

$$K_c \simeq \mu \eta(\epsilon_F - |\omega|) + K_c^d \quad (5.158)$$

unde K_c^d este partea în care apare influența dezordinii:

$$K_c^d = V_c \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \chi_{\rho\rho}(q, \omega) \quad (5.159)$$

iar $\chi_{\rho\rho}(q, \omega)$ este funcția de corelație densitate-densitate, introdusă prin:

$$\chi_{\rho\rho}(q, \omega) = \frac{1}{\pi N(0)} \cdot \text{Im} \Phi(q, \omega) \quad (5.160)$$

cu:

$$\Phi(q, \omega) = -\frac{N(0)}{\omega + iD(\omega)q^2} \quad (5.161)$$

unde $D(\omega)$ este un coeficient de difuzie dinamic, care pentru cazul tridimensional este modelat astfel:

$$D(\omega) = \begin{cases} D & , |\omega| < \omega_c = \frac{1}{\tau} \left(\frac{\sigma}{\sigma_c} \right)^3 \\ D_0(-i\omega\tau)^{1/3} & , |\omega| > \omega_c \end{cases} \quad (5.162)$$

iar D_0 este legat de conductivitatea statică σ_0 prin:

$$\sigma_0 = 2e^2 D_0 N(0)$$

Cu acest model s-a arătat că nucleul coulombian este:

$$K_c = \mu\eta(\epsilon_F - |\omega|) + \frac{\mu}{k_F l} \begin{cases} \frac{\sigma_c}{\sigma} & , |\omega| < \omega_c \\ \frac{1}{k_F l} (|\omega|\tau)^{-1/3} & , \omega_c < |\omega| < \tau^{-1} \sim \epsilon_F \end{cases} \quad (5.163)$$

Prima linie a formulei (5.163) corespunde regiunii metalice, în timp ce a doua corespunde zonei din vecinătatea tranziției spre izolator (pragul de mobilitate). Corespunzător primei regiuni, modificarea temperaturii critice, în limita cuplajului slab, este:

$$\frac{\delta T_c}{T_{c0}} \simeq -\frac{\mu}{(\lambda - \mu^*)^2} \cdot \frac{1}{k_F l} \cdot \frac{\sigma_c}{\sigma} \quad (5.164)$$

cu:

$$T_{c0} = 1,13 \cdot \omega_D \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\lambda - \mu^*} \right\} \quad (5.165)$$

și μ^* dat de (5.138). Din (5.163) mai observăm că în apropierea pragului de mobilitate repulsia coulombiană crește în mod apreciabil, temperatura critică scăzând în mod corespunzător.

O completare la teoria Eliashberg pentru supraconductorii dezordonați este dată de Leavens (1985). Aici se analizează efectul dezordinii asupra temperaturii critice, dar spre deosebire de alte studii, consideră, în plus, efectul dezordinii puternice care conduce la apariția unei contribuții coulombiene în funcția de renormare $Z(\omega)$. Această contribuție nu există în cazul pur, după cum s-a văzut în paragraful legat de supraconductorii cu cuplaj puternic. În acest model nucleul coulombian este considerat de forma:

$$K_c(\omega', \omega) = \mu C(\omega' - \omega) \eta(\epsilon_F - |\omega'|) \eta(\epsilon_F - |\omega|) \quad (5.166)$$

unde:

$$C(\omega) = \begin{cases} 1 + \pi(3/2k_F l)^2 \ln \alpha & , |\omega| < (\alpha\tau)^{-1} \\ 1 - \pi(3/2k_F l)^2 \ln(|\omega|\tau) & , (\alpha\tau)^{-1} < |\omega| < \tau^{-1} \\ 1 & , \tau^{-1} < |\omega| \end{cases} \quad (5.167)$$

unde τ este timpul de ciocnire, iar:

$$\alpha = \eta(\rho_c - \rho) + \left(\frac{\rho}{\rho_c}\right)^3 \eta(\rho - \rho_c) \quad (5.168)$$

În limita dezordinii puternice, $\rho > \rho_c$ și (5.168) se reduce la (5.157). Dacă dezordinea este absentă, $\rho < \rho_c$ și avem $\alpha = 1$, iar pseudopotentialul coulombian generalizat $\tilde{\mu}^*$ (5.155) se reduce la pseudopotentialul obișnuit (5.138). În acest model se consideră că efectul dezordinii apare brusc, la $\rho = \rho_c$, ceea ce conduce la o modificare bruscă a funcției $C(\omega)$ la $\omega = (\alpha\tau)^{-1}$. Pentru a vedea efectul coulombian în funcția de renormare $Z(\omega)$ scriem pentru început expresia self-energiei coulombiene. În cazul pur ea este dată de (5.98), sau de forma (5.99) dacă introducem funcția de renormare Z_c . Folosind (5.87) în (5.98) și exprimînd apoi $[1 - Z_c]\omega$, avem:

$$[1 - Z_c]\omega = - \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} V_c(\vec{p} - \vec{p}') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \text{Im} \left\{ \frac{Z z'}{Z^2 z'^2 - \epsilon^2 - \varphi^2} \right\} \tanh \frac{z'}{2T} \quad (5.169)$$

sau:

$$[1 - Z_c]\omega = -\mu \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \tanh \frac{z'}{2T} \int d\epsilon \cdot \text{Im} \left\{ \frac{Z z'}{Z^2 z'^2 - \epsilon^2 - \varphi^2} \right\} \quad (5.170)$$

În limita $T \rightarrow T_c$ ($\Delta \rightarrow 0$) integrala după ϵ este $-\pi$, și ținând seama că repulsia coulombiană este efectivă pentru $-\epsilon_F < z' < \epsilon_F$, (5.170) se reduce la:

$$1 - Z_c = \frac{\mu}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \cdot \eta(\epsilon_F - |z'|) \quad (5.171)$$

De aici, contribuția coulombiană la funcția de renormare (dată prin $\lambda_c^{(0)}$ în cazul pur) se poate scrie:

$$Z_c = 1 + \lambda_c^{(0)} \rightarrow \lambda_c^{(0)} = -\frac{\mu}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \cdot \eta(\epsilon_F - |z'|) \quad (5.172)$$

Din (5.172) se observă imediat că $\lambda_c^{(0)} = 0$, datorită imparității integrandului.

În prezența dezordinii, formula (5.171) capătă forma:

$$1 - Z_c^{(r)} = \frac{\mu}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot C(z' - \omega) \cdot \eta(\epsilon_F - |z'|) \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \quad (5.173)$$

și:

$$\lambda_c = -\frac{\mu}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot C(z' - \omega) \cdot \eta(\epsilon_F - |z'|) \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \quad (5.174)$$

Definim:

$$\delta\lambda_c = \lambda_c - \lambda_c^{(0)} = -\frac{\mu}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot [C(z' - \omega) - 1] \cdot \eta(\epsilon_F - |z'|) \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \quad (5.175)$$

de unde:

$$\delta\lambda_c = -\frac{\mu}{2\omega} \left[\int_{-\epsilon_F}^0 dz' \cdot C(z' - \omega) \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} + \int_0^{\epsilon_F} dz' \cdot C(z' - \omega) \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \right]$$

Făcînd schimbarea de variabilă $z' \rightarrow -z'$ în prima integrală, se găsește:

$$\delta\lambda_c = -\frac{\mu}{\omega} \int_0^{\epsilon_F} dz' \cdot \frac{C(z' - \omega) - C(z' + \omega)}{2} \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \quad (5.176)$$

care în limita $\omega \rightarrow 0$ se reduce la:

$$\delta\lambda_c(0) = \mu \int_0^{\epsilon_F} dz' \cdot \frac{dC(z')}{dz'} \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \quad (5.177)$$

Folosind (5.167) precum și faptul că în regim de dezordine puternică $\epsilon_F \tau \sim 1 \rightarrow k_F l \sim 2$, avem:

$$\frac{dC(z')}{dz'} = \begin{cases} -\frac{9\pi}{16z'} & , \frac{\epsilon_F}{\alpha} \leq z' \leq \epsilon_F \\ 0 & , z' < \frac{\epsilon_F}{\alpha} \end{cases} \quad (5.178)$$

Cu acest rezultat:

$$\delta\lambda_c(0) = -\frac{9\pi\mu}{16} \int_{\epsilon_F/\alpha}^{\epsilon_F} \frac{dz'}{z'} \cdot \tanh \frac{z'}{2T_c} \quad (5.179)$$

Considerînd $\epsilon_F/\alpha \gg T_c$, $\tanh(z'/2T_c) \simeq 1$ în intervalul de integrat, și:

$$\delta\lambda_c(0) \simeq -\frac{9\pi\mu}{16} \cdot \ln \alpha \quad (5.180)$$

Ținînd seama și de efectele coulombiene (în prezența dezordinii), funcția de renormare $Z(\omega)$ va fi:

$$Z(\omega) = 1 + \lambda + \delta\lambda_c(\omega) \quad (5.181)$$

cu $\delta\lambda_c(\omega)$ dat de ec.(5.176). Este de remarcat că pentru un sistem puternic dezordonat $Z(\omega)$ descrește cu creșterea gradului de dezordine, ceea ce duce la creșterea temperaturii critice cu creșterea concentrației de impurități nemagnetice. Acest rezultat este contrar constatărilor experimentale, fiind clar că trebuie să existe alte mecanisme care conduc la degradarea valorii temperaturii critice în prezența dezordinii. De exemplu, în anumiți supraconductori (*Nb* sau *V*) temperaturile de tranziție sînt puternic reduse datorită fluctuațiilor de spin (paramagnoni). Este deci interesant de studiat efectul dezordinii în prezența fluctuațiilor de spin și apoi asupra temperaturii critice.

Influența fluctuațiilor de spin

Intr-un metal de tranziție pur, în care momentele magnetice atomice lipsesc, fluctuațiile de spin apar cînd sistemul electronic metalic se găsește în vecinătatea stării feromagnetice. Intr-un astfel de metal apariția supraconductibilității este mai puțin favorabilă (de exemplu, *Pd* și *Pt* practic nu sînt supraconductoare, deși momentele magnetice atomice lipsesc). La modul

simplu, interacțiunile de schimb feromagnetic favorizează o aliniere paralelă a spinilor, în timp ce supraconductibilitatea favorizează o aliniere antiparalelă a acestora. Această repulsie, indusă de spin, poate fi de câteva ori mai mare decât pseudopotentialul coulombian. Dacă această polarizare de spin persistă în timp și spațiu suficient, repulsia de schimb poate domina atracția fononică și deci suprima supraconductibilitatea. Pentru început vedem problema fluctuațiilor de spin în faza normală a metalului. Considerăm modelul simplu în care electronii de tip "s" ecranează interacția dintre electronii de tip "d", astfel încât aceștia din urmă interacționează numai când se află pe același atom. Atunci, hamiltonianul de interacție dintre electroni (hamiltonianul Hubbard) este:

$$H = U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \quad (5.182)$$

unde U este repulsia Hubbard, iar $n_{j\sigma} = c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$ este operatorul număr de electroni în poziția j și cu spinul σ .

Susceptibilitatea dinamică $\chi(\vec{q}, \omega)$ se obține prin prelungirea analitică la axa reală pentru funcția $\chi(\vec{q}, \omega_n)$ calculată în aproximația RPA. Această funcție rezultă din sumarea seriei care ia în considerare ciocnirile multiple electron-gol:

$$\begin{aligned} \chi_{RPA}(\vec{q}, \omega_n) &= \text{diagrama 1} + \text{diagrama 2} + \text{diagrama 3} + \dots = \\ &= \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega_n)}{1 - U\chi_0(\vec{q}, \omega_n)} \end{aligned} \quad (5.183)$$

unde în aproximația de ordinul zero:

$$\chi_0(\vec{q}, \omega_n) = \text{diagrama 4}$$

$$= -T \sum_{n'} \sum_{\vec{p}} G_0(\vec{p}, \omega_{n'}) G_0(\vec{p} + \vec{q}, \omega_n + \omega_{n'}) \quad (5.184)$$

Din (5.183) susceptibilitatea dinamică este:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0 U_L(\vec{q}, \omega)}{1 - UN(0) U_L(\vec{q}, \omega)} \quad (5.185)$$

unde $\chi_0 = 2\mu_B^2 N(0)$ este susceptibilitatea Pauli, iar $U_L(\vec{q}, \omega)$ este funcția Lindhard. În limita statică ($\omega \rightarrow 0$) și în domeniul lungimilor de undă mari ($q \rightarrow 0$), funcția Lindhard se bucură de proprietatea:

$$U_L(0, 0) = 1 \quad (5.186)$$

Atunci, din condiția de instabilizare magnetică a sistemului $\chi(0, 0) \rightarrow \infty$ și din (5.185), avem:

$$UN(0) = 1 \quad (5.187)$$

care este tocmai criteriul Stoner de apariție a feromagnetismului. Comportarea susceptibilității $\chi(\vec{q}, \omega)$ se obține ușor pentru q și ω mici ($q/2p_F \ll 1$, $\omega/qv_F \ll 1$), când:

$$U_L(q, \omega) = 1 - \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2p_F} \right)^2 + i \cdot \frac{\pi\omega}{2qv_F} + \dots \quad (5.188)$$

astfel încât susceptibilitatea statică este:

$$\chi(\vec{q}, 0) \simeq \frac{\chi_0}{1 - UN(0) + \frac{1}{3} UN(0) \left(\frac{q}{2p_F} \right)^2} \quad (5.189)$$

adică de tip Ornstein-Zernicke. Pe măsură ce ne apropiem de punctul de instabilitate feromagnetică, raza de corelație a fluctuațiilor crește după legea:

$$r \sim \frac{1}{\sqrt{1 - UN(0)}}$$

iar relația de dispersie pentru excitațiile din sistemul de spini (care se mai numesc și paramagnoni) este liniară:

$$\omega_q \sim [1 - UN(0)] v_F q = v_p q \quad (5.190)$$

Paramagnonii sînt excitații bosonice ale sistemului electronic. Cînd $UN(0) \rightarrow 1$ se observă că viteza paramagnonilor $v_p = [1 - UN(0)]v_F \ll v_F$. Atunci, în vecinătatea instabilității feromagnetice, electronii interacționează puternic cu paramagnonii, ceea ce conduce la o renormare apreciabilă a masei electronice.

Pentru a vedea cum se modifică temperatura critică în prezența fluctuațiilor de spin vom considera corecția corespunzătoare la self-energia electronică. Ea este dată de seria de diagrame care ia în considerare ciocnirile multiple:

$$\Sigma_m =$$

Setul de diagrame de mai sus poate fi redesenat în următoare formă echivalentă:

$$\Sigma_m =$$

Procese reprezentînd o serie infinită de diagrame sînt procese virtuale de emisie și absorbție a cuasiparticulelor de tip Bose, pentru care avem propagatorul:

$$\vec{q}$$

$$= \text{diagram with shaded rectangle} \cdot \tilde{t}(\vec{q}, \omega) - \text{diagram with dashed rectangle and U} \quad (5.191)$$

Ultima formă reprezintă definiția matricii \tilde{t} particulă-gol, ca o sumă infinită de ciocniri multiple a unei particule cu un gol (de spin opus). Matricea \tilde{t} se determină din ecuația Dyson:

$$\tilde{t}(\vec{q}, \omega) = \text{diagram with shaded rectangle} = U \cdot \text{diagram with dashed rectangle} + U \cdot \text{diagram with dashed rectangle and shaded rectangle} \cdot \tilde{t}(\vec{q}, \omega)$$

Expresia corespunzătoare este însă supraestimată, deoarece ea include și diagrama de ordinul unu, care este de fapt interacția coulombiană din ecuațiile Eliashberg și care este luată deja în considerare (ducând la pseudopotentialul coulombian). Scăzând această contribuție obținem doar partea de interes, notată prin:

$$\tilde{t}(\vec{q}, \omega) = -U^2 \cdot \chi_{RPA}(\vec{q}, \omega) \quad (5.192)$$

(pe care o numim totuși matricea \tilde{t}).

Atunci, corecția la energia electronică devine:

$$\Sigma_m(\vec{p}, \omega_n) = -T \sum_{n'} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} \cdot \tau_1 g(\vec{p}', \omega_{n'}) \tau_1 \cdot \tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', \omega_n - \omega_{n'}) \quad (5.193)$$

Diferența față de Σ_{ph} constă în apariția matricilor τ_1 în locul matricilor τ_3 (și evident a matricii \tilde{t} în locul propagatorului fononic). Aceasta se întâmplă așa deoarece când un paramagnon este emis sau absorbit de către un electron, spinul electronic își schimbă orientarea. Aceasta conduce la un efect distructiv asupra stării supraconductoare. Procedând în continuare ca și în cazul fononic, avem pentru $g(\vec{p}', \omega_{n'})$ forma (5.77), iar pentru $\tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', \omega_n - \omega_{n'})$:

$$\tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', \omega_n - \omega_{n'}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \cdot \frac{(-2) \cdot \text{Im}\{\tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', z)\}}{i(\omega_n - \omega_{n'}) - z} \quad (5.194)$$

Folosind (5.194), (5.77) și (5.81) în (5.193), obținem:

$$\Sigma_m(\vec{p}, \omega_n) = \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \cdot \text{Im}\{\tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', z)\} \cdot 2\tau_1 \text{Im}\{g(\vec{p}', z')\} \tau_1 \cdot \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{i\omega_n - z - z'} \quad (5.195)$$

Mediind expresia de mai sus la suprafața Fermi, după o regulă de forma (5.84) și trecînd de la integrala după impulsuri la cea după energii (5.85), găsim:

$$\Sigma_m(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \int \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} \cdot \text{Im}\{\tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', z)\} \left(\int \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \right)^{-1} \cdot \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{\omega - z - z' + i\delta} \cdot \text{Re} \left\{ \frac{Zz' \cdot 1 + \varphi\tau_1}{\sqrt{Z^2 z'^2 - \varphi^2}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.196)$$

Pe de altă parte avem:

$$\Sigma_m(\omega) = [1 - Z_m(\omega)] \omega \cdot 1 + \varphi_m(\omega) \tau_1 \quad (5.197)$$

Identificînd coeficienții matricilor 1 și τ_1 , obținem:

$$[1 - Z_m(\omega)] \omega = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \int \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} \cdot \text{Im}\{\tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', z)\} \left(\int \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \right)^{-1} \cdot \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{\omega - z - z' + i\delta} \cdot \text{Re} \left\{ \frac{z'}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\}$$

sau:

$$[1 - Z_m(\omega)] \omega = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot K_m(z', \omega) \cdot \text{Re} \left\{ \frac{z'}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.198)$$

unde $K_m(z', \omega)$ este nucleul ecuației integrale și este dat de:

$$K_m(z', \omega) = \int_0^{\infty} dz \cdot \frac{g_m(z)}{2}$$

$$\left[\frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{z' + z - \omega - i\delta} - \frac{\tanh(z'/2T) - \coth(z/2T)}{z' - z - \omega - i\delta} \right] \quad (5.199)$$

cu:

$$g_m(z) = \int \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \int \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} \cdot \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', z) \} \right] \left(\int \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \right)^{-1} \quad (5.200)$$

iar de la matricile τ_1 :

$$\varphi_m(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \int \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \int \frac{d^2 p'}{v_{\vec{p}'}} \cdot \text{Im} \{ \tilde{t}(\vec{p} - \vec{p}', z) \} \left(\int \frac{d^2 p}{v_{\vec{p}}} \right)^{-1}$$

$$\cdot \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{\omega - z - z' + i\delta} \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\}$$

sau:

$$\varphi_m(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot K_m(z', \omega) \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.201)$$

Considerînd acum și mecanismul fononic, self-energia totală devine:

$$\Sigma = \Sigma_{ph} + \Sigma_m = [1 - Z(\omega)]\omega \cdot 1 + \varphi(\omega)\tau_1 \quad (5.202)$$

cu:

$$[1 - Z(\omega)]\omega = - \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot [K_{ph}(z', \omega) + K_m(z', \omega)] \cdot \text{Re} \left\{ \frac{z'}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.203)$$

și:

$$\varphi(\omega) = \varphi_{ph}(\omega) + \varphi_m(\omega) = Z(\omega)\Delta(\omega)$$

unde $\varphi_{ph}(\omega)$ este dat de (5.96). Atunci:

$$Z(\omega)\Delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \cdot [K_{ph}(z', \omega) - K_m(z', \omega)] \cdot \text{Re} \left\{ \frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2 - \Delta^2(z')}} \right\} \text{sign}\{z'\} \quad (5.204)$$

Procedînd asemănător cu cazul fononic, obținem următoarea formulă pentru temperatura critică:

$$T_c = 1,13 \cdot \bar{\omega} \cdot \exp \left\{ -\frac{1 + \lambda + \lambda_m}{\lambda - \lambda_m} \right\} \quad (5.205)$$

unde $\bar{\omega}$ este o frecvență de tăiere ($\bar{\omega} \approx \omega_D$), iar factorul de slăbire a perechii este:

$$\lambda_m = 2 \int_0^\infty \frac{dz}{z} \cdot g_m(z) \quad (5.206)$$

$g_m(z)$ exprimat prin relația (5.200) poate fi rescris sub următoarea formă echivalentă:

$$g_m(z) = N(0) \int_0^{2p_F} \frac{q \cdot dq}{2p_F^2} \left[-\frac{1}{\pi} \cdot \text{Im} \{ \tilde{t}(\vec{q}, z) \} \right] \quad (5.207)$$

unde $\vec{q} = \vec{p} - \vec{p}'$. Folosind (5.192), (5.185) cu unitățile alese în așa fel încît $2\mu_B^2 = 1$ și (5.188), se găsește expresia lui $\tilde{t}(\vec{q}, z)$. Extrăgînd partea imaginară, iar apoi efectuînd integralele după q și z se găsește (v.probl. 5.5) că λ_m este dat de:

$$\lambda_m \simeq a \cdot UN(0) \cdot \ln \frac{1}{1 - UN(0)} \quad (5.208)$$

unde a este o constantă de ordinul unității. Se observă că λ_m prezintă, în limita $UN(0) \rightarrow 1$, o divergență logaritmică (valabilă pentru sistemele tridimensionale). Acest rezultat, obținut de Berk și Schrieffer (1966), arată că în apropierea instabilității magnetice λ_m crește foarte mult, T_c scăzînd atunci în mod apreciabil. Este posibil ca datorită valorii mari a parametrului de slăbire a perechii, supraconductibilitatea să fie chiar distrusă. În cazul sistemelor bidimensionale (v.probl. 5.6) λ_m prezintă, cînd $UN(0) \rightarrow 1$, o singularitate de tipul $[1 - UN(0)]^{-1}$, care este mult mai puternică decît cea logaritmică, specifică sistemelor tridimensionale.

Revenim la sistemele tridimensionale, punîndu-ne problema ce fel de comportament are λ_m atunci cînd avem fluctuații de spin în prezența dezordinii (introdusă prin impurități nemagnetice). Vom numi aceste fluctuații **paramagnoni difuzivi**. Pentru a calcula λ_m în acest caz, folosim formulele (5.206) și (5.207). În formula (5.207) limita superioară de integrare va fi considerată impulsul de tăiere $2q_c$, iar matricea \tilde{t} este:

$$\tilde{t}(\vec{q}, z) = -U^2 \cdot \chi_{RPA}(\vec{q}, z) = -U^2 \frac{\chi_0(\vec{q}, z)}{1 - U\chi_0(\vec{q}, z)} \quad (5.209)$$

unde $\chi_0(\vec{q}, z)$ are forma difuzivă:

$$\chi_0(\vec{q}, z) = N(0) \frac{Dq^2}{Dq^2 - iz} \quad (5.210)$$

Folosind (5.210) în (5.209) și extrăgând partea imaginară, avem:

$$\text{Im} \tilde{t}(\vec{q}, z) = - \frac{U^2 N(0) D q^2 z}{z^2 + [1 - UN(0)]^2 D^2 q^4} \quad (5.211)$$

Înlocuind acest rezultat în (5.207), iar apoi formula obținută în (5.206) și efectuând integralele după z și după q (în această ordine), obținem:

$$\lambda_m^d = \frac{[UN(0)]^2}{1 - UN(0)} \cdot \left(\frac{q_c}{p_F} \right)^2 \quad (5.212)$$

(indicele superior indică prezența dezordinii). Dacă impulsul de tăiere q_c este egal cu p_F , (5.212) se reduce la:

$$\lambda_m^d = \frac{[UN(0)]^2}{1 - UN(0)} \quad (5.213)$$

Totuși, după cum am văzut în capitolul precedent, în problemele de difuzie, impulsul superior de tăiere este de ordinul $q_c \sim 1/\sqrt{D\tau}$, cu $D = v_F^2 \tau / 3$ (în cazul sistemelor tridimensionale). Cu această tăiere superioară, λ_m^d devine dependent de concentrația de impurități (prin inversul timpului de ciocnire), dar forma singularității, când $UN(0) \rightarrow 1$, se păstrează. În acest caz, λ_m^d este dat de următoarea relație:

$$\lambda_m^d = \frac{3}{4(\epsilon_F \tau)^2} \cdot \frac{[UN(0)]^2}{1 - UN(0)} \quad (5.214)$$

Din (5.214) se vede că λ_m^d depinde de gradul de dezordine din sistem, crescând odată cu creșterea acesteia. Fizic acest fapt poate fi interpretat astfel: Odată cu creșterea dezordinii, viteza paramagnonilor difuzivi scade, iar atunci efectul lor distructiv asupra împerecherii electron-electron persistă mai mult timp, deci este mai eficient (în sens distructiv). Pentru cazul unei dezordini moderate, $\epsilon_F \tau \sim 10$, și când sistemul se află foarte aproape de instabilitatea magnetică, $UN(0) \rightarrow 1$, efectul paramagnonilor difuzivi este mai pronunțat decât cel al paramagnonilor clasici.

Efectul oscilațiilor Friedel

Teoria microscopică a supraconductibilității este construită pentru sisteme care prezintă invarianță la translații, datorită simplificărilor care apar când lucrăm în reprezentarea impulsului. Chiar și în cazul aliajelor supraconductoare, care prezintă neuniformități, invarianța la translații este refăcută aplicând metoda medierii peste impuritățile distribuite haotic. În contrast, teoria aliajelor metalice în faza normală (Friedel 1952) este bazată pe simetria sferică corespunzătoare atomului de impuritate. Efectul impurității este exprimat prin deplasarea de fază găsită din soluția ecuației Schrödinger. Dacă se face un calcul analog, dar pentru cazul unei impurități sferice într-un supraconductor (Fetter 1965), se găsește că parametrul de ordine $\Delta(r)$ prezintă oscilații spațiale de rază lungă (oscilații Friedel). Dorim să vedem ce efect au aceste oscilații ale parametrului de ordine asupra temperaturii critice. Acest studiu a fost făcut de Zhitomirski și Walker (1998), care au calculat corecțiile, introduse de oscilațiile parametrului de ordine, la formula Abrikosov-Gorkov și în condițiile în care se consideră supraconductori cu lungime de coerență mică (cum este cazul cupraților de temperatură critică ridicată).

- Cazul impurităților nemagnetice: În supraconductorii de tip "s", cu potențialul de împrăștiere de scurtă rază de acțiune $U(\vec{r}) = U\delta(\vec{r})$, și pentru o concentrație mică de impurități, expresia temperaturii critice este:

$$T_c = T_c^{(0)} + \frac{\pi}{2\tau} \cdot \frac{T_c^{(0)}}{\epsilon_F} \cdot \ln\left(\frac{2\omega_c}{\Delta_0}\right) \quad (5.215)$$

unde Δ_0 este gap-ul supraconductor la $T = 0^\circ K$ și pentru un sistem pur, τ este timpul de ciocnire (dat de ec.(4.37)), iar ω_c o frecvență de tăiere. Din (5.215) se observă că o mică concentrație de impurități nemagnetice poate duce la creșterea temperaturii critice, dacă contribuția altor efecte este neglijată. Acest rezultat nu contrazice teorema Anderson, care este valabilă numai pentru supraconductori omogeni spațial și ne spune că variațiile spațiale a lui Δ reduc efectul de rupere a perechilor de electroni.

- Cazul impurităților magnetice: Considerăm un spin clasic care interacționează cu electronii de conducție, interacția fiind descrisă de hamiltonianul de schimb:

$$H = J\delta(\vec{r})S_i\sigma_i$$

unde σ_i sînt matricile de spin Pauli. În acest caz temperatura critică este dată de următoarea relație:

$$T_c = T_c^{(0)} - \frac{\pi}{4\tau_s} \left[1 - 5,1\alpha^2 \cdot \frac{T_c^{(0)}}{\epsilon_F} \cdot \ln \left(\frac{2\omega_c}{\Delta_0} \right) \right] \quad (5.216)$$

unde: $\alpha = JS\pi N(0)$ și $1/\tau_s = \alpha^2 n_i / \pi N(0)$, ($\hbar = 1$). Aici, modificarea temperaturii critice este dependentă de valoarea factorului perturbativ α și prezintă o micșorare a efectului, față de cazul impurităților nemagnetice, datorită factorului suplimentar $-\pi/4\tau_s$.

- Impurități nemagnetice în supraconductori neconvenționali: Considerăm situația în care avem impurități nemagnetice într-un supraconductor anizotrop, pentru care $\Delta(\vec{k}) = \Delta f(\vec{k})$. În acest caz, variațiile spațiale a parametrului de ordine conduc la următoarea expresie pentru temperatura critică:

$$T_c = T_c^{(0)} - \frac{\pi}{8\tau} \left(1 - f \cdot \frac{T_c^{(0)}}{\epsilon_F} \right) \quad (5.217)$$

unde f ia în general valori între 3 și 5. Totuși, experimente de impurificare a supraconductorului $Y - 123$ cu Zn conduc la valori a factorului f de ordinul 10 sau chiar mai mari. Aceste rezultate pot fi legate de natura bidimensională a materialelor oxidice supraconductoare.

Impurități în sisteme ne-fermionice

Studiul comportamentului de tip lichid ne-fermionic este deosebit de important în cazul supraconductoarelor de temperatură critică ridicată. Cele mai puternice argumente pentru un astfel de studiu se leagă de dependența de temperatură a unor mărimi corespunzătoare stării normale a acestor materiale. Aici putem menționa, dependența liniară de temperatură a rezistivității (pe un interval de câteva sute de grade), dependența de tip T^2 pentru unghiul Hall, rezistivitatea de-a lungul axei c . Aceste dependențe nu pot fi explicate cu ajutorul teoriei convenționale a lichidului Fermi.

În cele ce urmează o să ne concentrăm atenția asupra comportamentului rezistivității (în faza normală), pentru compușii pe bază de oxizi de cupru (CuO), și în limita temperaturilor foarte scăzute. Rezistivitatea de-a lungul

direcției c , $\rho_c(T)$, crește cu descreșterea temperaturii, în timp ce rezistivitatea din plan, $\rho_{ab}(T)$ are un comportament exact opus, fiind liniară în T pînă în vecinătatea lui T_c . Din aceste constatări am putea presupune că, dacă nu ar apărea supraconductibilitatea, $\rho_c \rightarrow \infty$, iar $\rho_{ab} \rightarrow \text{finit}$, atunci cînd $T \rightarrow 0$. Un punct de vedere alternativ (Kotliar et.al. 1989, 1990) pentru această situație ar fi acela că ρ_{ab} tinde de asemenea la infinit, atunci cînd $T \rightarrow 0$. Acest tip de comportament s-ar datora ciocnirilor pe impurități într-un lichid ne-fermionic. Experimente recente (Ando et.al.1995, Boebinger et.al.1996) au confirmat presupunerea de mai sus, găsindu-se că $\rho_{ab}(T) \sim \rho_c(T) \sim \ln T$. Pentru a explica această dependență de temperatură a rezistivității vom analiza efectul împrăstierii pe impurități nemagnetice în lichidul Fermi marginal (Varma et.al.1989). Modelul lichidului Fermi marginal a fost introdus pentru a explica o serie de proprietăți neobișnuite, din starea normală a materialelor oxidice supraconductoare cu temperatură critică ridicată. Deosebirea esențială față de lichidul Fermi obișnuit constă în forma ratei de atenuare a cuasiparticulelor, care este:

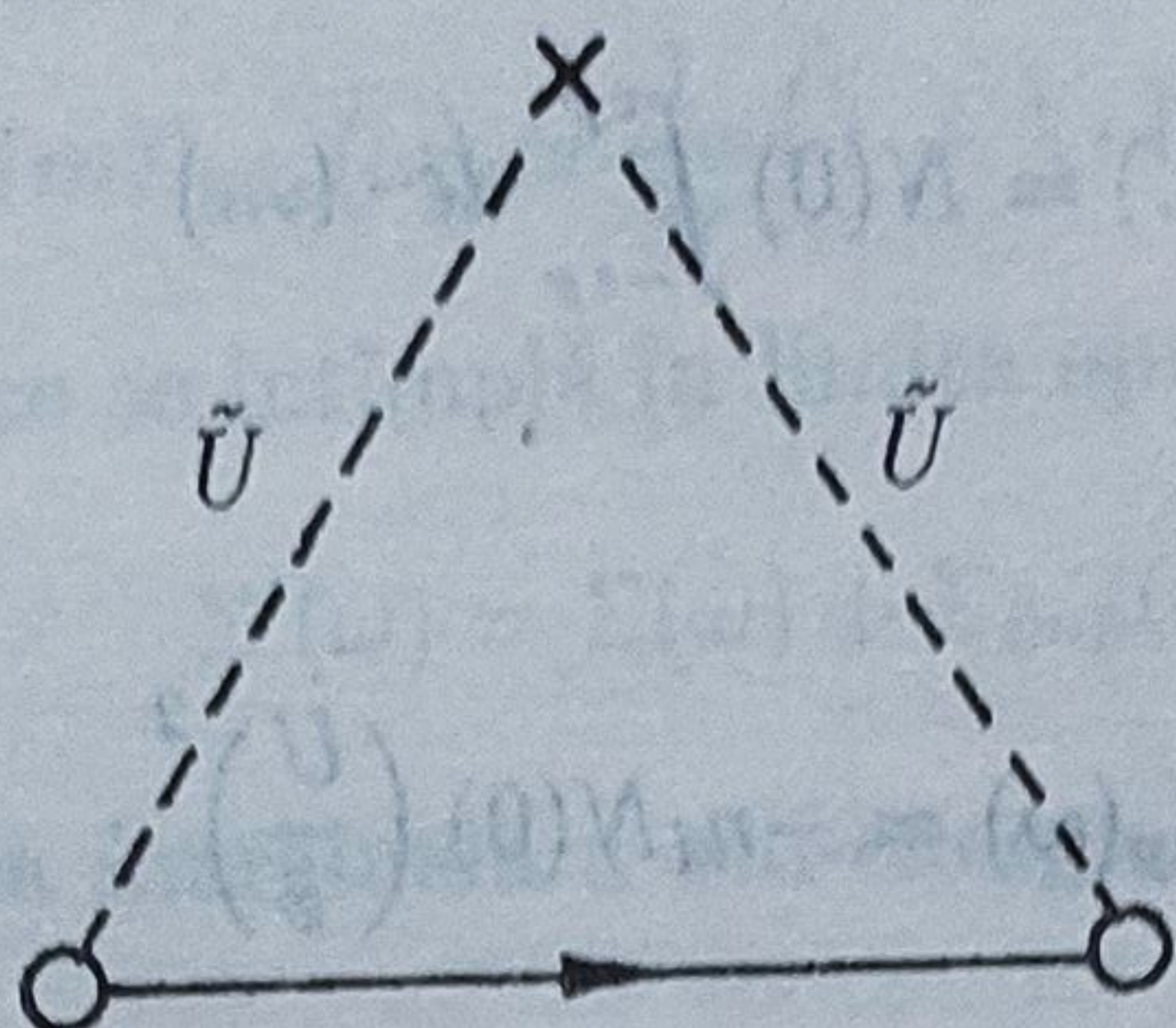
$$\frac{1}{\tau_q} \sim |\omega - \mu|$$

spre deosebire de cazul lichidului Fermi obișnuit, unde avem o dependență pătratică de energie. Atunci, în cazul lichidului Fermi marginal, self-energia cuasiparticulelor este considerată de forma următoare:

$$\Sigma(\omega, T) = \tilde{\lambda} \left[\omega \cdot \ln \left(\frac{x}{\omega_c} \right) - i\pi x \right] \quad (5.218)$$

unde $x = \max(\omega, T)$, ω_c este o energie de tăiere superioară, iar $\tilde{\lambda}$ o constantă de cuplaj.

Considerăm lichidul Fermi marginal în prezența impurităților nemagnetice, care sînt distribuite în mod haotic, pentru care potențialul de împrăstiere este de scurtă rază de acțiune, iar concentrația lor este suficient de mică. Expresia self-energiei, datorită împrăstierii pe impurități, este dată de diagrama următoare:



căreia îi corespunde expresia analitică:

$$\Sigma_{imp}(\omega) = n_i \sum_{\vec{k}} \tilde{U}^2 G'(\vec{k}, \omega) \quad (5.219)$$

unde n_i este concentrația de impurități, \tilde{U} potențialul de împrăștiere renormat:

$$\tilde{U} = \frac{U}{z} \quad (5.220)$$

unde z este funcția de renormare, dată de relația:

$$\frac{1}{z} = 1 - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re} \Sigma(\omega) \quad (5.221)$$

cu $\Sigma(\omega)$ din (5.218), iar funcția Green $G'(\vec{k}, \omega)$ este:

$$G'(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k - \Sigma'(\omega)} \quad (5.222)$$

cu:

$$\Sigma'(\omega) = \text{Re} \Sigma'(\omega) + i \cdot \text{Im} \Sigma'(\omega) \quad (5.223)$$

Din (5.219) avem:

$$\text{Im} \Sigma_{imp}(\omega) = n_i \left(\frac{U}{z} \right)^2 \sum_{\vec{k}} \text{Im} G'(\vec{k}, \omega) \quad (5.224)$$

unde (folosind (5.222) și (5.224)):

$$\text{Im} G'(\vec{k}, \omega) = \frac{\text{Im} \Sigma'(\omega)}{[\omega - \epsilon_k - \text{Re} \Sigma'(\omega)]^2 + [\text{Im} \Sigma'(\omega)]^2} \quad (5.225)$$

Trecînd de la sumarea după impulsuri la integrarea după energii:

$$\sum_{\vec{k}}(\dots) = N(0) \int_{-\epsilon_F}^{\epsilon_F} d\epsilon \cdot (\dots)$$

și folosind (5.225), obținem:

$$Im\Sigma_{imp}(\omega) = -n_i N(0) \left(\frac{U}{z}\right)^2 \cdot \left[\arctan\left(\frac{\omega - \epsilon_F - Re\Sigma'(\omega)}{Im\Sigma'(\omega)}\right) - \arctan\left(\frac{\omega + \epsilon_F - Re\Sigma'(\omega)}{Im\Sigma'(\omega)}\right) \right] \quad (5.226)$$

Pentru excitații de joasă frecvență:

$$\omega - \epsilon_F - Re\Sigma'(\omega) \simeq -\epsilon_F$$

$$\omega + \epsilon_F - Re\Sigma'(\omega) \simeq \epsilon_F$$

și atunci:

$$Im\Sigma_{imp}(\omega) = \frac{2n_i N(0) U^2}{z^2} \cdot \arctan\left(\frac{\epsilon_F}{Im\Sigma'(\omega)}\right) \quad (5.227)$$

Folosind (4.37) cu $\hbar = 1$, (5.227) se rescrie astfel:

$$Im\Sigma_{imp}(\omega) = \frac{1}{\pi\tau} \cdot \frac{1}{z^2} \cdot \arctan\left(\frac{\epsilon_F}{Im\Sigma'(\omega)}\right) \quad (5.228)$$

Dacă $\omega \gg T$, atunci (din ec.(5.218)):

$$Re\Sigma(\omega) = \tilde{\lambda}\omega \cdot \ln\left(\frac{\omega}{\omega_c}\right)$$

și, dacă $\tilde{\lambda}$ este mic, avem pentru funcția de renormare z următoarea expresie:

$$\frac{1}{z} \simeq 1 + \tilde{\lambda} \cdot \ln\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right) \quad (5.229)$$

În plus, pentru $\epsilon_F \gg Im\Sigma_{imp}(\omega)$, avem:

$$\arctan\left(\frac{\epsilon_F}{Im\Sigma'(\omega)}\right) \simeq \frac{\pi}{2}$$

și atunci:

$$Im\Sigma_{imp}(\omega) \simeq \frac{1}{2\tau} \left(1 + \tilde{\lambda} \cdot \ln \frac{\omega_c}{\omega} \right)^2 \quad (5.230)$$

Vedem în continuare ce se întâmplă în limita opusă. Pentru aceasta scriem:

$$\Sigma'(\omega) = \Sigma(\omega) + \Sigma_{imp}(\omega) \quad (5.231)$$

unde $\Sigma(\omega)$ este partea marginală a self-energiei. Înlocuind în (5.228) acest rezultat, obținem:

$$\begin{aligned} Im\Sigma_{imp}(\omega) &= \frac{1}{\pi\tau} \cdot \frac{1}{z^2} \cdot \arctan \left(\frac{\epsilon_F}{Im\Sigma(\omega) + Im\Sigma_{imp}(\omega)} \right) \simeq \\ &\simeq \frac{1}{\pi\tau} \cdot \frac{1}{z^2} \cdot \frac{\epsilon_F}{Im\Sigma(\omega) + Im\Sigma_{imp}(\omega)} \end{aligned}$$

iar de aici:

$$Im\Sigma_{imp}(\omega) \cdot Im\Sigma(\omega) + [Im\Sigma_{imp}(\omega)]^2 \simeq \frac{\epsilon_F}{\pi\tau} \cdot \frac{1}{z^2}$$

Aproximînd membrul stîng din expresia de mai sus prin contribuția predominantă, avem:

$$Im\Sigma_{imp}(\omega) \approx \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\pi\tau}} \cdot \frac{1}{z} \approx \tilde{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\pi\tau}} \cdot \ln \left(\frac{\omega_c}{\omega} \right) \quad (5.232)$$

Dacă $\omega \ll T$ ($\omega \rightarrow 0$), în relația (5.232) vom face înlocuirea $\omega \rightarrow \pi T$ și:

$$Im\Sigma_{imp}(T) \approx \tilde{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\pi\tau}} \cdot \ln \left(\frac{\omega_c}{\pi T} \right) \quad (5.233)$$

Ținînd seama că:

$$\frac{1}{2\tau(T)} = Im\Sigma_{imp}(T)$$

avem:

$$\frac{1}{\tau(T)} = -2\tilde{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\pi\tau}} \cdot \ln \left(\frac{\pi T}{\omega_c} \right) \quad (5.234)$$

Cum:

$$\rho(T) = \frac{m}{ne^2\tau(T)} \quad (5.235)$$

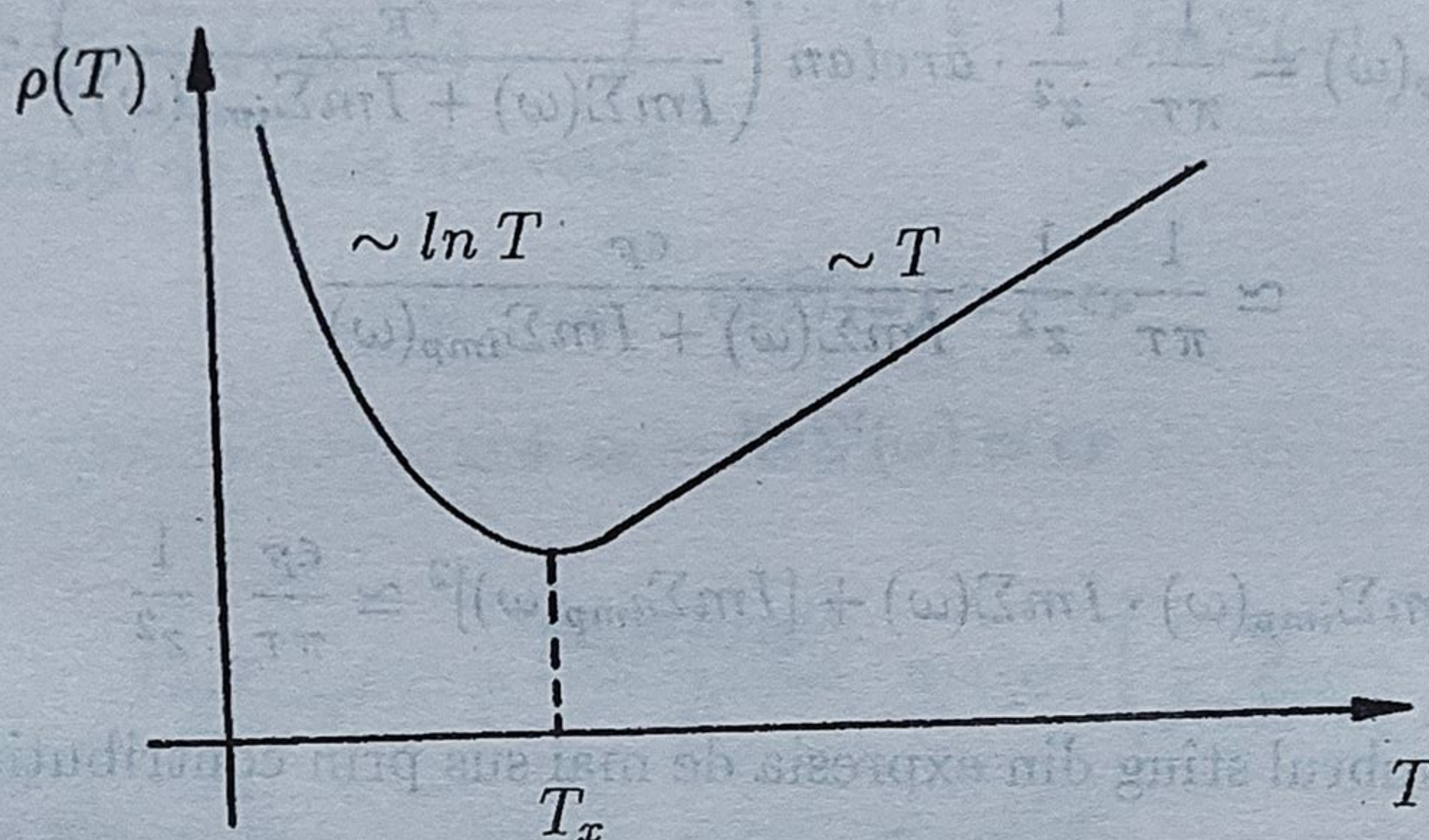
obținem:

$$\rho(T) = -\frac{2m\tilde{\lambda}}{ne^2} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\pi\tau}} \cdot \ln\left(\frac{\pi T}{\omega_c}\right) \quad (5.236)$$

De aici observăm că pentru temperaturi foarte scăzute $\rho(T)$ prezintă un comportament de tipul:

$$\rho(T) \sim \ln T$$

în acord cu constatările experimentale. Dependența calitativă de temperatură pentru rezistivitate este următoarea:



La stînga temperaturii T_x (temperatura de crossover) avem predominanța regimului de împrăștiere pe impurități (cu $1/\tau$ dat de (4.37)), iar la dreapta lui T_x avem predominanța regimului de tip marginal (cu $\tau = l/v_F$, l fiind parcursul liber mediu). Temperatura de crossover T_x se determină din egalitatea:

$$\frac{1}{2\tau} \left[1 + \tilde{\lambda} \cdot \ln\left(\frac{\omega_c}{\pi T_x}\right) \right]^2 = \tilde{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\pi\tau}} \cdot \ln\left(\frac{\omega_c}{\pi T_x}\right) \quad (5.237)$$

Deoarece T_x este suficient de mic, avem:

$$\frac{1}{2\tau} \cdot \tilde{\lambda}^2 \cdot \left[\ln\left(\frac{\omega_c}{\pi T_x}\right) \right]^2 \simeq \tilde{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\pi\tau}} \cdot \ln\left(\frac{\omega_c}{\pi T_x}\right)$$

de unde:

$$\ln\left(\frac{\omega_c}{\pi T_x}\right) \simeq \tilde{\lambda}^{-1} \sqrt{\frac{4\epsilon_F\tau}{\pi}}$$

Cum însă:

$$\epsilon_F \tau = \frac{k_F v_F \tau}{2} = \frac{k_F l}{2}$$

obținem imediat că:

$$T_x \approx \frac{\omega_c}{\pi} \cdot \exp \left\{ -\tilde{\lambda}^{-1} \sqrt{k_F l} \right\} \quad (5.238)$$

Observăm că în cazul unei dezordini slabe ($k_F l \gg 1$) temperatura de cross-over T_x este foarte scăzută, iar regimul pentru care $\rho(T) \sim \ln T$ este restrâns la temperaturi foarte mici.

Probleme

5.1 Justificați relațiile (5.11) și (5.12).

5.2 Să se arate că, pentru o suprafață sferică ($\hbar = 1$):

$$\int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^3} = N(0) \int_0^{2p_F} \frac{dq \cdot q}{2p_F^2} \int d\epsilon'$$

cu:

$$N(0) = \frac{mp_F}{2\pi^2} \quad \vec{p} - \vec{p}' = \vec{q}$$

5.3 Să se repete problema precedentă pentru cazul bidimensional, considerînd un contur Fermi circular.

5.4 Să se demonstreze că densitatea de stări pentru o singură orientare a spinului și per atom, pentru un sistem tridimensional și fără interacții poate fi scrisă sub forma:

$$N_a(\epsilon_F) = \frac{N(\epsilon_F)}{N} = \frac{1}{\pi \epsilon_F} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \int_0^{k_F r_{ws}} d\rho \cdot \rho^2 \cdot j_l^2(\rho)$$

unde r_{ws} este raza sferei Wigner-Seitz, iar $j_l(\rho)$ sînt funcțiile Bessel sferice. Să se arate că această densitate de stări are în proporție de 47,5% caracter "s", 43,1% caracter "p" și 8,5% caracter "d".

5.5 Parametrul de slăbire a perechii Cooper, pentru metale cu tendință feromagnetică, este:

$$\lambda_m = 2 \int_0^\infty \frac{dz}{z} \cdot g_m(z)$$

unde:

$$g_m(z) = N(0) \left\langle -\frac{1}{\pi} \cdot \text{Im} t(q, z) \right\rangle_{SF}$$

Aici $\langle \dots \rangle_{SF}$ înseamnă medierea la suprafața Fermi, iar:

$$t(q, z) = -U^2 \cdot \chi_{RPA}(q, z)$$

U fiind repulsia Hubbard. Să se arate că pentru un sistem tridimensional și în limita $UN(0) \rightarrow 1$, λ_m prezintă o divergență logaritmică.

5.6 Să se determine parametrul λ_m pentru un sistem bidimensional, pentru care:

$$\text{Re} \chi_0(q, z) \simeq N(0)$$

$$\text{Im} \chi_0(q, z) \simeq N(0) \cdot \frac{z}{v_F q}$$

pentru: $z < v_F q$, $q < 2p_F$ și:

$$\text{Im} \chi_0(q, z) = 0$$

pentru: $z > v_F q$.

5.7 Pentru un sistem bidimensional de electroni în interacție, legea de dispersie este:

$$\epsilon_k = \frac{k_x k_y}{m}$$

cu: $|k_x| < k_c$, $|k_y| < k_c$, iar m -masa electronului. Folosind limita:

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \cdot \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2}$$

și definind densitatea de stări per spin prin:

$$N(\epsilon) = \frac{1}{4mD} \int_{-k_c}^{k_c} dk_x \int_{-k_c}^{k_c} dk_y \cdot \delta(\epsilon - \epsilon_k) \quad D = \frac{k_c^2}{m}$$

arătați că:

$$N(\epsilon) = N_0 \cdot \ln \left| \frac{D}{\epsilon} \right|$$

cu: $N_0 = 1/2D$ și $\epsilon < D$.

5.8 Folosind ecuația BCS ($\hbar = k_B = 1$):

$$1 = \frac{V}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\epsilon \cdot N(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2(T)}} \cdot \tanh \left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2(T)}}{2T} \right)$$

cu densitatea de stări logaritmică:

$$N(\epsilon) = N_0 \cdot \ln \left| \frac{D}{\epsilon} \right|$$

arătați că:

a)

$$\frac{2}{VN_0} = -2 \int_0^{x_0} \frac{dx}{x} \cdot \tanh \left(\frac{x}{a} \right) \cdot \ln x = -2 \cdot I(x_0, a)$$

unde: $x_0 = \omega_D/D$ și $a = 2T_c/D \ll 1$.

b) Dacă aproximăm:

$$\tanh \left(\frac{x}{a} \right) = \begin{cases} x/a & , x < a \\ 1 & , x > a \end{cases}$$

obținem:

$$I(x_0, a) \simeq \ln a - 1 + \frac{1}{2}(\ln x_0)^2 - \frac{1}{2}(\ln a)^2$$

c) Luînd cel mai divergent termen din expresia lui $I(x_0, a)$, găsim următoarea expresie pentru temperatura critică:

$$T_c \simeq \frac{D}{2} \cdot \exp \left(-\sqrt{\frac{2}{N_0 V}} \right)$$

5.9 Considerăm, la $T = 0^0 K$, un supraconductor bidimensional într-un câmp magnetic $B < H_{c2}$. Considerăm deasemenea că, în supraconductor câmpul este uniform și suficient de intens pentru a avea niveluri Landau. Nivelurile Landau formează o serie de funcții delta la aceeași distanță unele de altele, densitatea de stări fiind:

$$N(\epsilon) = D \cdot \hbar\omega_c \sum_n \delta(\epsilon - \epsilon_n) \quad D = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$$

unde ω_c este frecvența ciclotronică, iar:

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar\omega_c - \mu$$

(μ -potențialul chimic).

a) Arătați că în prezența nivelurilor Landau ecuația BCS pentru gap este:

$$1 = \frac{VD}{2} \cdot \hbar\omega_c \sum_n \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \epsilon_n^2}}$$

b) Considerînd că n verifică inegalitatea $|\epsilon_n| \leq \theta_D$, unde θ_D este temperatura Debye ($k_B = 1$) și folosind formula de transformare Poisson:

$$\sum_n \rightarrow \int dn + 2 \sum_s \int dn \cdot \cos(2\pi ns)$$

pentru armonica de ordinul cel mai scăzut ($s = 1$), arătați că:

$$1 = VD \cdot [I_1 - 2 \cdot \cos(a\mu) \cdot I_2]$$

unde: $a = 2\pi/\hbar\omega_c$ și:

$$I_1 = \operatorname{arcsinh} \left(\frac{\theta_D}{\Delta} \right) \quad I_2 = \int_0^{\theta_D} \frac{d\tilde{\epsilon} \cdot \cos(a\tilde{\epsilon})}{\sqrt{\Delta^2 + \tilde{\epsilon}^2}}$$

c) Pentru $\hbar\omega_c \ll \theta_D$, Δ arătați că:

$$\Delta \simeq \Delta_0 \left[1 - 2 \cdot \cos(a\mu) \cdot \frac{\sin(a\theta_D)}{a\theta_D} \right] \quad \Delta \ll \theta_D$$

unde Δ_0 este soluția ecuației:

$$1 = VD \cdot \operatorname{arcsinh} \left(\frac{\theta_D}{\Delta_0} \right)$$

și $\Delta_0 \ll \theta_D$.

5.10 Pentru un lichid ne-Fermi funcția Green este:

$$G^0(k, \omega) = \frac{\omega_c^{-\alpha}}{(i\omega - \epsilon_k)^{1-\alpha}}$$

cu $0 < \alpha < 1$. Supraconductibilității în lichidul ne-Fermi îi corespunde următoarea ecuație pentru gap:

$$1 = V \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{(i\omega_n - \epsilon_k)^{1-\alpha} (i\omega_n + \epsilon_k)^{1-\alpha} \omega_c^{2\alpha} - |\Delta_k|^2}$$

unde V este interacția de împerechere, iar $\beta = 1/T$, ($\hbar = k_B = 1$).

a) Arătați că temperatura critică este dată de relația:

$$T_c^{2\alpha} = \frac{1}{C(\alpha)} \left[D(\alpha) \cdot \omega_D^{2\alpha} - \frac{\omega_c^{2\alpha}}{A(\alpha) \cdot \lambda} \right]$$

unde:

$$C(\alpha) = \Gamma^2(\alpha) [1 - 2^{1-2\alpha}] \zeta(2\alpha) \quad D(\alpha) = \frac{\Gamma(1-2\alpha) \Gamma(\alpha)}{2\alpha \cdot \Gamma(1-\alpha)}$$

$$A(\alpha) = \frac{2^{2\alpha}}{\pi} \cdot \sin[\pi(1-\alpha)] \quad \lambda = N(0)V$$

b) Reobțineți rezultatul BCS trecînd la limita $\alpha \rightarrow 0$.

5.11 Considerînd efectul de ecranare și teoria răspunsului liniar arătați că, în aproximația adiabatică, frecvența fononică modificată, datorită acestui efect, este dată de:

$$\omega_q = \Omega_q \sqrt{1 - \left(\frac{\Omega_{pl}}{\Omega_q} \right)^2 v(q) \chi(q)}$$

unde Ω_q -este frecvența fononică în absența ecranării, Ω_{pl} -este frecvența plasmei ionice, $v(q)$ -transformata Fourier a potențialului coulombian, iar $\chi(q)$ -funcția susceptibilitate.

5.12 Considerăm un sistem unidimensional, format din N fermioni de masă m fiecare, și avînd dimensiunea L . Între particule se manifestă forțe atractive de tip funcție δ . Calculați potențialul chimic μ în cazurile cînd densitatea $\rho = N/L$ tinde către infinit și respectiv către zero.

5.13 Folosind rezultatele problemei precedente, estimați valoarea λ_c pentru care are loc trecerea între regimul BCS și regimul de gaz Bose.

5.14 Pseudopotențialul coulombian μ se definește prin:

$$\mu = N(0)V_c$$

unde, $N(0)$ este densitatea de stări pentru o singură orientare a spinului, iar V_c este o medie a lui $V_c(q)$ peste toți vectorii q care leagă două puncte de pe suprafața Fermi. Să se calculeze expresia lui μ pentru un sistem tridimensional ($\hbar = \epsilon_0 = 1$).

5.15 Să se repete problema precedentă, pentru cazul bidimensional, ($\hbar = \epsilon_0 = 1$) și $k_2 < 2k_F$, unde $k_2 = 2me^2$ este vectorul de ecranare.

5.16 Considerăm supraconductibilitatea într-un sistem tridimensional. Densitatea de stări electronice (pentru $\epsilon > 0$) este:

$$N(\epsilon) = N_0 \left(\frac{\epsilon}{D} \right)^r \quad r > -1$$

a) Folosind ecuația BCS (pentru $\epsilon > 0$):

$$1 = V \int_0^{\omega_c} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2(T)}} \cdot N(\epsilon) \cdot \tanh \left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2(T)}}{2T} \right) \quad \hbar = k_B = 1$$

calculați expresia pentru temperatura critică T_c . (Folosiți forma aproximativă pentru funcția $\tanh(x/a)$, și $\omega_c > 2T_c$).

b) Obțineți rezultatul *BCS* pentru T_c trecînd la limita $r \rightarrow 0$.

c) Cunoscînd expresia densității de stări pentru un sistem fermionic tridimensional ($\sim \epsilon^{1/2}$), este posibilă apariția supraconductibilității pentru $\lambda = N_0 V$ oricît de mic, în acest caz ?

5.17 Considerăm un supraconductor pentru care densitatea de stări electronice este:

$$N(\epsilon) = N_0 \cdot \exp \left\{ -\frac{\epsilon}{D} \right\} \quad \epsilon > 0$$

a) Folosind ecuația *BCS* ($\epsilon > 0$) din problema precedentă și aproximația pentru $\tanh(x/a)$, arătați că pentru $D = \omega_c$ temperatura critică în acest caz este aproximativ $0,45T_c^{(0)}$, unde $T_c^{(0)}$ este temperatura critică pentru $N(\epsilon) = N_0 = \text{const.}$ ($2T_c/D \ll 1$).

b) Folosind expresia pentru T_c determinată la punctul a), obțineți rezultatul *BCS* considerînd limita $D \rightarrow \infty$.

5.18 Calculați temperatura critică pentru un supraconductor a cărui densitate de stări electronice este:

$$N(\epsilon) = N_0 \left[1 + \frac{g}{\pi} \cdot \frac{a}{a^2 + \epsilon^2} \right]$$

Folosiți aproximația pentru $\tanh(x/b)$ precum și faptul că $\omega_c > 2T_c$ și $2T_c/a \ll 1$. Reobțineți rezultatul *BCS* clasic, luînd limitele $g \rightarrow 0$ și apoi $a \rightarrow \infty$ în expresia finală pentru T_c obținută cu ajutorul lui $N(\epsilon)$.

5.19 Pentru un sistem supraconductor tridimensional, în prezența paramagnonilor difuzivi, arătați că dacă frecvența z (din relația (5.206)) este limitată superior la valoarea ω_c , atunci expresia parametrului de slăbire a perechii λ_m^d , este dată de relația:

$$\lambda_m^d = \frac{3}{8\pi} \left[\frac{UN(0)}{1 - UN(0)} \right]^2 \cdot \frac{\omega_c \tau}{(\epsilon_F \tau)^2}.$$

$$\left\{ \frac{4(1 - UN(0))}{\omega_c \tau} \arctan \frac{\omega_c \tau}{4(1 - UN(0))} + \frac{1}{2} \ln \left(1 + \left[\frac{4(1 - UN(0))}{\omega_c \tau} \right]^2 \right) \right\}$$

care se reduce la expresia (5.214) atunci cînd $\omega_c \rightarrow \infty$.

5.20 Temperatura critică pentru un supraconductor, în prezența dezordinii, este dată de relația:

$$T_c = 1,13 \cdot \omega_D \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\lambda - \tilde{\mu}^*} \right\}$$

unde $\tilde{\mu}^*$ este dat de ec.(5.155). Notînd cu $T_c^{(0)}$ expresia temperaturii critice în absența dezordinii, arătați că $T_c < T_c^{(0)}$, deoarece:

$$\ln \left(\frac{T_c}{T_c^{(0)}} \right) = -\frac{\mu^*}{(\lambda - \mu^*)^2} \cdot \frac{9\pi}{16(\epsilon_F \tau)^2} \cdot \ln \alpha$$

cu:

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu \ln(\epsilon_F / \omega_D)} \quad \alpha = (\rho / \rho_c)^3 > 1$$

Capitolul VI

TRANZITIA METAL-IZOLATOR

Funcția de memorie

Urmărim să găsim funcții de răspuns pentru sisteme compuse dintr-un număr mare de particule, fără a avea restricții, cum ar fi regimul hidrodinamic (discutat în Cap.I) sau regimul de frecvențe înalte. Tehnica dezvoltată aici va fi aplicată pentru a determina conductivitatea dinamică. Folosind ecuația de transport a lui Boltzmann (v.Cap.III), în aproximația timpului de relaxare, obținem formula clasică a lui Drude. Această aproximație este însă imposibil de utilizat dacă timpul de relaxare τ este dependent de frecvență. Modelul ales pentru metal este modelul "jellium", în care electronii de conducție se mișcă într-un mediu încărcat uniform cu sarcină electrică pozitivă. Hamiltonianul sistemului este:

$$H = H_s + H_c + H' + H_0 \quad (6.1)$$

Aici H_s reprezintă hamiltonianul liber al electronilor de conducție:

$$H_s = \sum_p \epsilon(p) c_p^+ c_p \quad (6.2)$$

unde c_p^+ și c_p sînt operatorii de creare și de anihilare electronici, $p = (\vec{p}, \sigma)$ cu $\sigma = \pm 1/2$, iar operatorii electronici verifică relațiile de anticomutare obișnuite. H_c descrie interacția coulombiană a electronilor:

$$H_c = \frac{1}{2} \sum v_c(k) c_{\vec{p}+\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{p}-\vec{k},\sigma'}^+ c_{\vec{p}',\sigma'} c_{\vec{p},\sigma} \quad (6.3)$$

Aici, spre deosebire de (5.147), avem:

$$v_c(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2} (1 - \delta_{\vec{k},0}) \quad (6.4)$$

datorită modelului "jellium" considerat. Termenul H' este datorat interacțiunii electronior cu "abaterile de la uniformitate", cum ar fi impuritățile și fononii:

$$H' = H_1 + H_2 + H_3 \quad (6.5)$$

unde:

$$H_1 = \frac{1}{N} \sum_j \langle \vec{k} | U_1^j | \vec{k}' \rangle c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k}',\sigma} \quad (6.6)$$

și:

$$H_2 = \frac{1}{N} \sum_j \langle \vec{k} | U_2^j | \vec{k}' \rangle S_j^z s_{\sigma,\sigma'}^i c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k}',\sigma'} \quad (6.7)$$

Aici, U_1^j și U_2^j sînt potențialele de împrăștiere fără răsturnarea spinului și pentru împrăștierea cu răsturnarea spinului, cauzate de impuritatea care se află la poziția \vec{r}_j , iar S_j^z și $S_j^\pm = (S_j^x \pm iS_j^y)/\sqrt{2}$ sînt operatorii de spin pentru impuritate. Suma după j se ia peste cele N_i poziții ale impurităților. Dacă N este numărul total de celule al rețelei, definim concentrația de impurități prin N_i/N . Impuritățile sînt distribuite haotic, astfel încît pentru a determina mărimi de interes fizic trebuie să efectuăm medierea pe impurități. H_3 descrie interacția electron-fonon:

$$H_3 = \sum \left[D(\vec{k} - \vec{k}') c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k}',\sigma} b_{\vec{k}-\vec{k}'} + c.h. \right] \quad (6.8)$$

unde $b_{\vec{q}}^+$ și $b_{\vec{q}}$ sînt operatorii de creare și anihilare pentru fononii cu impulsul \vec{q} . Dacă, pentru simplitate, considerăm cazul fononilor longitudinali, elementul de matrice al interacției electron-fonon este:

$$D(\vec{q}) = (2m_i N \omega_q)^{-1/2} q \cdot C(q) \quad , \quad q = |\vec{q}| \quad (6.9)$$

unde m_i este masa ionică, ω_q -frecvența fononică, iar $C(q)$ o funcție slab dependentă de q . Mai considerăm că există un cîmp magnetic exterior B , aplicat de-a lungul axei Oz , astfel încît:

$$H_0 = H_d + H_{ph} \quad (6.10)$$

cu:

$$H_d = h \sum_j S_j^z \quad , \quad h = \mu_B g_d B \quad (6.11)$$

iar H_{ph} este hamiltonianul fononic, dat de relația:

$$H_{ph} = \sum \omega_q \left(b_q^+ b_q + \frac{1}{2} \right) \quad (6.12)$$

folosind unitățile $\hbar = k_B = 1$.

Răspunsul liniar pentru un operator A datorat unei perturbații (cuplate cu operatorul B) este (v. și Cap.I) dat prin funcția de corelare:

$$\chi_{AB}(z) \equiv \langle\langle A; B \rangle\rangle_z = i \int_0^\infty e^{izt} \langle[A(t), B(0)]\rangle \cdot dt \quad (6.13)$$

iar în limita frecvențelor mari are următoarea formă (descrescătoare):

$$\chi_{AB}(z) = \frac{\langle[A, B]\rangle}{z}, \quad |z| \rightarrow \infty \quad (6.14)$$

În plus $\chi_{AB}(z)$ verifică ecuația de mișcare:

$$\begin{aligned} z \cdot \langle\langle A; B \rangle\rangle &= \langle[A, B]\rangle + \langle\langle[A, H]; B\rangle\rangle = \\ &= \langle[A, B]\rangle - \langle\langle A; [B, H]\rangle\rangle \end{aligned} \quad (6.15)$$

Aici $A(t)$ înseamnă reprezentarea Heisenberg pentru operatorul A , iar $\langle \dots \rangle$ reprezintă medierea termodinamică și medierea peste impuritățile distribuite haotic. $\chi(z)$ poate fi reprezentată prin integrala spectrală (1.17):

$$\chi(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \frac{\chi''(\omega)}{\omega - z} \quad (6.16)$$

unde $\chi''(\omega)$ este partea imaginară (disipativă) a funcției de răspuns. Funcția de corelare curent-curent $\chi(z)$ este legată de conductivitatea dinamică $\sigma(z)$ prin relația:

$$\sigma(z) = -i \cdot \frac{e^2}{z} \cdot \chi(z) + i \cdot \frac{\omega_p^2}{4\pi z} \quad (6.17)$$

Aici $\omega_p^2 = 4\pi e^2 n/m$ este frecvența plasmei electronice, iar n, m și e reprezintă concentrația, masa și sarcina electronilor. În plus, $\chi(z)$ se bucură de proprietățile:

$$\begin{aligned} \chi(z) &= \chi(-z) \\ \chi^*(z) &= \chi(z^*) \end{aligned} \quad (6.18)$$

(ceea ce ne asigură că $\chi'(\omega)$ și $\chi''(\omega)$ sînt reali), și:

$$\omega \chi''(\omega) > 0 \quad (6.19)$$

χ_0 este limita statică pentru $\chi(z)$. Ținînd seama că $\sigma(0) = \text{finit}$ și folosind (6.17), găsim imediat că în limita statică:

$$\chi_0 = \frac{n}{m} \quad (6.20)$$

(deci $\chi_0 \neq \chi(z)$).

Introducem funcția de memorie $M(z)$, definită prin:

$$M(z) = \frac{z \cdot \chi(z)}{\chi_0 - \chi(z)} \quad (6.21)$$

Datorită faptului că $\chi_0 \neq \chi(z)$, $M(z)$ este funcție olomorfă în planul complex (cu excepția axei reale). Datorită proprietăților (6.18), $M(z)$ verifică relațiile de simetrie:

$$\begin{aligned} M^*(z) &= M(z^*) \\ M(z) &= -M(-z) \end{aligned} \quad (6.22)$$

iar în limita asimptotică descrește ca $1/z$. Evident, pentru $M(z)$ putem scrie reprezentarea spectrală:

$$M(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \cdot \frac{M''(\omega)}{\omega - z} \quad (6.23)$$

unde:

$$M(\omega \pm i\epsilon) = M'(\omega) \pm iM''(\omega), \quad \epsilon \rightarrow 0 \quad (6.24)$$

cu M' și M'' funcții reale care satisfac relațiile:

$$\begin{aligned} M'(\omega) &= -M'(-\omega) \\ M''(\omega) &= M''(-\omega) \end{aligned} \quad (6.25)$$

Rezolvînd (6.21) pentru $\chi(z)$ obținem:

$$\chi(z) = \frac{\chi_0 M(z)}{z + M(z)} \quad (6.26)$$

Introducând (6.26) în (6.17) și folosind $\omega_p^2 = 4\pi e^2 \chi_0$, găsim expresia conductivității:

$$\sigma(z) = \frac{i}{4\pi} \cdot \frac{\omega_p^2}{z + M(z)} \quad (6.27)$$

Folosind (6.27) cu $z = \omega \pm i\epsilon$, (6.24) și $\omega_p^2 = 4\pi e^2 n/m$, obținem $\sigma(\omega \pm i\epsilon)$:

$$\sigma(\omega \pm i\epsilon) = \frac{e^2 n}{m} \cdot \frac{i[\omega + M'(\omega)] \pm M''(\omega)}{[\omega + M'(\omega)]^2 + [M''(\omega)]^2} \quad (6.28)$$

Pentru a ajunge, folosind (6.27), la formula clasică Drude, dezvoltăm în serie M pentru frecvențe mici:

$$M(\omega \pm i\epsilon) = \pm iM''(0) + \omega \left(\frac{\partial}{\partial \omega} M'(\omega) \right)_{\omega=0} \quad (6.29)$$

avînd:

$$\sigma(\omega \pm i\epsilon) = \frac{i}{4\pi} \cdot \frac{\omega_p^2}{\omega \left[1 + \left(\frac{\partial}{\partial \omega} M'(\omega) \right) \Big|_{\omega=0} \right] + i(\epsilon \pm M''(0))}, \quad \epsilon \rightarrow 0$$

sau:

$$\sigma(\omega \pm i\epsilon) = \frac{i}{4\pi} \cdot \frac{\omega_p^2}{\left[1 + \left(\frac{\partial}{\partial \omega} M'(\omega) \right) \Big|_{\omega=0} \right] \left[\omega \pm iM''(0) \left[1 + \left(\frac{\partial}{\partial \omega} M'(\omega) \right) \Big|_{\omega=0} \right]^{-1} \right]} \quad (6.30)$$

Notăm:

$$a = \left[1 + \left(\frac{\partial}{\partial \omega} M'(\omega) \right) \Big|_{\omega=0} \right]^{-1} \quad (6.31)$$

avînd:

$$\sigma(\omega \pm i\epsilon) = \frac{i}{4\pi} \cdot \frac{a\omega_p^2}{\omega \pm iaM''(0)} \quad (6.32)$$

Mărimea $aM''(0)$ are dimensiunea inversului unei durate, deci:

$$aM''(0) = \frac{1}{\tau} \quad (6.33)$$

și:

$$\sigma(\omega \pm i\epsilon) = \frac{i}{4\pi} \cdot \frac{a\omega_p^2}{\omega \pm \frac{i}{\tau}}$$

sau:

$$\sigma(\omega \pm i\epsilon) = \frac{i}{4\pi} \cdot a\omega_p^2 \frac{\omega \mp \frac{i}{\tau}}{\omega^2 + \left(\frac{1}{\tau}\right)^2} \quad (6.34)$$

Cu: $\omega_p^2 = 4\pi e^2 n/m$, (6.34) devine:

$$\sigma(\omega \pm i\epsilon) = \frac{ne^2 a}{m} \cdot \frac{i\omega \pm \frac{1}{\tau}}{\omega^2 + \left(\frac{1}{\tau}\right)^2} \quad (6.35)$$

(6.35) este chiar formula Drude pentru conductivitatea dinamică, τ fiind timpul de relaxare, iar a o constantă care renormează sarcina electrică și a cărei valoare este apropiată de unitate. Deci, pentru $\omega = 0$, $a \sim 1$, din (6.35) regăsim conductivitatea statică:

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m} \quad (6.36)$$

Vedem în continuare problema funcției de memorie și a conductivității dinamice cu ajutorul teoriei sistemelor de multe particule. Considerăm că electronii se mișcă în potențialul creat de impurități statice, distribuite haotic, n_i -fiind concentrația lor. Interacția electronilor cu impuritățile este descrisă de hamiltonianul:

$$H = \int d\vec{r} \cdot \psi^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + \sum_i V(\vec{r} - \vec{r}_i) \right) \psi(\vec{r}) \quad (6.37)$$

unde $V(\vec{r} - \vec{r}_i)$ este potențialul împrăștiator (creat de impuritate), \vec{r}_i -poziția impurității, iar \vec{r} - poziția electronului. Funcția Green uniparticulă este:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -i \langle \phi_0 | T[\psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}')] | \phi_0 \rangle \quad (6.38)$$

Aici: $\vec{r} \equiv (\vec{r}, t)$, $\vec{r}' \equiv (\vec{r}', t')$, iar $|\phi_0\rangle$ este starea fundamentală a sistemului cu interacții. Transformata Fourier a lui $G(\vec{r}, \vec{r}')$ este:

$$G(\vec{p}, \vec{p}'; \omega) = \sum_n \varphi_n(\vec{p}) \varphi_n^*(\vec{p}') \left[\frac{1 - f_n}{\omega - \epsilon_n + i0} + \frac{f_n}{\omega - \epsilon_n - i0} \right] \quad (6.39)$$

unde $\varphi_n(\vec{p})$ sînt stările proprii ale lui H corespunzătoare energiilor ϵ_n :

$$H\varphi_n(\vec{p}) = \epsilon_n \varphi_n(\vec{p}) \quad (6.40)$$

$f_n \equiv f(\epsilon_n)$ este funcția Fermi, iar $i\epsilon$ s-a înlocuit cu $i0$, deoarece $\epsilon \rightarrow 0$.

Definim funcțiile Green retardată și avansată prin:

$$G^{R,A}(\vec{p}, \vec{p}'; \omega) = \sum_n \frac{\varphi_n(\vec{p}) \varphi_n^*(\vec{p}')}{\omega - \epsilon_n \pm i0} \quad (6.41)$$

Pentru un sistem de fermioni în absența interacțiilor funcția Green este:

$$G^0(\vec{p}, \vec{p}'; \omega) = \frac{\delta(\vec{p} - \vec{p}')}{\omega - \frac{p^2}{2m} + i\epsilon \cdot \text{sign}(|\vec{p}| - p_F)} \quad (6.42)$$

Funcția de răspuns densitate, conform ec.(6.13), este:

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = i \int_0^\infty dt \cdot e^{i(\omega + i0)t} \langle \phi_0 | [\rho(\vec{r}, t), \rho(\vec{r}', 0)] | \phi_0 \rangle \quad (6.43)$$

unde $\rho(\vec{r})$ este operatorul densitate definit prin:

$$\rho(\vec{r}) = \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \sum_{n,n'} \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) c_n^\dagger c_{n'} \quad (6.44)$$

Folosind (6.44), (6.43) devine (v. și Cap.I):

$$\chi(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = \sum_{n,n'} \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) \varphi_{n'}^*(\vec{r}') \varphi_n(\vec{r}') \cdot \frac{f_{n'} - f_n}{\omega + \epsilon_n - \epsilon_{n'}} \quad (6.45)$$

După efectuarea medierii pe impurități (care reface invarianța la translații a sistemului) avem:

$$\langle \chi(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) \rangle \rightarrow \chi(\vec{r} - \vec{r}'; \omega)$$

iar apoi prin transformata Fourier obținem:

$$\begin{aligned} \chi(\vec{q}, \omega) &= \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \sum_{n, n'} \left\langle \varphi_{n'}(\vec{p}_+) \varphi_{n'}^*(\vec{p}'_+) \varphi_n(\vec{p}'_-) \varphi_n^*(\vec{p}_-) \frac{f_{n'} - f_n}{\omega + \epsilon_n - \epsilon_{n'}} \right\rangle = \\ &= \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ [f(E + \omega) - f(E)] \langle G^R(\vec{p}_+, \vec{p}'_+; E + \omega) G^A(\vec{p}'_-, \vec{p}_-; E) \rangle + \right. \\ &\quad \left. + f(E) \langle G^R(\vec{p}_+, \vec{p}'_+; E + \omega) G^R(\vec{p}'_-, \vec{p}_-; E) \rangle - \right. \end{aligned}$$

$$-f(E + \omega) \langle G^A(\vec{p}_+, \vec{p}'_+; E + \omega) G^A(\vec{p}'_-, \vec{p}_-; E) \rangle \} \quad (6.46)$$

unde $\langle \dots \rangle$ implică medierea pe impurități, iar:

$$\vec{p}_{\pm} = \vec{p} \pm \frac{\vec{q}}{2}$$

Definind mărimile:

$$\Phi^{RA}(E, \omega; \vec{q}) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle G^R(\vec{p}_+, \vec{p}'_+; E + \omega) G^A(\vec{p}'_-, \vec{p}_-; E) \rangle \quad (6.47)$$

$$\Phi^{RR}(E, \omega; \vec{q}) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle G^R(\vec{p}_+, \vec{p}'_+; E + \omega) G^R(\vec{p}'_-, \vec{p}_-; E) \rangle \quad (6.48)$$

$$\Phi^{AA}(E, \omega; \vec{q}) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle G^A(\vec{p}_+, \vec{p}'_+; E + \omega) G^A(\vec{p}'_-, \vec{p}_-; E) \rangle \quad (6.49)$$

$\chi(\vec{q}, \omega)$ devine:

$$\begin{aligned} \chi(\vec{q}, \omega) = & - \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ [f(E + \omega) - f(E)] \Phi^{RA}(E, \omega; \vec{q}) + \right. \\ & \left. + f(E) \Phi^{RR}(E, \omega; \vec{q}) - f(E + \omega) \Phi^{AA}(E, \omega; \vec{q}) \right\} \end{aligned} \quad (6.50)$$

În limita frecvențelor mici și la $T = 0$ K avem:

$$f(E + \omega) - f(E) = -\omega \cdot \delta(E - \epsilon_F) \quad (6.51)$$

cu care (6.50) devine:

$$\begin{aligned} \chi(\vec{q}, \omega) = & - \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ -\omega \cdot \delta(E - \epsilon_F) \Phi^{RA}(E, \omega; \vec{q}) + \right. \\ & \left. + f(E) \Phi^{RR}(E, \omega; \vec{q}) - f(E + \omega) \Phi^{AA}(E, \omega; \vec{q}) \right\} = \\ & = \omega \cdot \Phi^{RA}(\epsilon_F, \omega; \vec{q}) + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ f(E + \omega) \Phi^{AA}(E, \omega; \vec{q}) - f(E) \Phi^{RR}(E, \omega; \vec{q}) \right\} = \\ & = \omega \cdot \Phi^{RA}(\epsilon_F, \omega; \vec{q}) + \end{aligned}$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot f(E) \{ \Phi^{AA}(E, \omega; \vec{q}) - \Phi^{RR}(E, \omega; \vec{q}) \} + \\ + \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot \omega \cdot \frac{\partial f(E)}{\partial E} \cdot \Phi^{AA}(E, \omega; \vec{q}) \quad (6.52)$$

In limita $\omega \rightarrow 0$, $\vec{q} \rightarrow 0$ aproximăm (6.52) prin:

$$\chi(\vec{q}, \omega) \simeq \omega \cdot \Phi^{RA}(\epsilon_F, \omega; \vec{q}) + \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot f(E) \{ \Phi^{AA}(E, 0; 0) - \Phi^{RR}(E, 0; 0) \} \quad (6.53)$$

Deoarece:

$$G^A(\vec{p}, \vec{p}'; E) = [G^R(\vec{p}, \vec{p}'; E)]^*$$

avem:

$$\begin{aligned} \Phi^{RR}(E, 0; 0) &= -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle G^R(\vec{p}, \vec{p}'; E) G^R(\vec{p}', \vec{p}; E) \rangle = \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle [G^A(\vec{p}, \vec{p}'; E)]^* [G^A(\vec{p}', \vec{p}; E)]^* \rangle = \\ &= - \left[-\frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \langle G^A(\vec{p}, \vec{p}'; E) G^A(\vec{p}', \vec{p}; E) \rangle \right]^* = - [\Phi^{AA}(E, 0; 0)]^* \end{aligned} \quad (6.54)$$

Folosind această relație, (6.53) poate fi scrisă astfel:

$$\begin{aligned} \chi(\vec{q}, \omega) &= \omega \cdot \Phi^{RA}(\epsilon_F, \omega; \vec{q}) - \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot f(E) \{ [\Phi^{RR}(E, 0; 0)]^* + \Phi^{RR}(E, 0; 0) \} = \\ &= \omega \cdot \Phi^{RA}(\epsilon_F, \omega; \vec{q}) + \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot f(E) \{ -2 \cdot \text{Re} \Phi^{RR}(E, 0; 0) \} \end{aligned} \quad (6.55)$$

Observînd că:

$$-2 \cdot \text{Re} \Phi^{RR}(E, 0; 0) = \text{Im} [-2i \cdot \Phi^{RR}(E, 0; 0)] \quad (6.56)$$

obținem:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \omega \cdot \Phi^{RA}(\epsilon_F, \omega; \vec{q}) + \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot f(E) \cdot \text{Im} [-2i \cdot \Phi^{RR}(E, 0; 0)] \quad (6.57)$$

Se poate arăta ușor (v. problema 6.1) că:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot f(E) \cdot \text{Im} [-2i \cdot \Phi^{RR}(E, 0; 0)] = N(0) \quad (6.58)$$

unde $N(0)$ este densitatea de stări la nivelul Fermi, astfel încât (6.57) devine:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \omega \cdot \Phi^{RA}(\epsilon_F, \omega; \vec{q}) + N(0) \quad (6.59)$$

scriind:

$$\Phi^{RA}(\epsilon_F, \omega; \vec{q}) \equiv \Phi(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \left(-\frac{1}{2\pi i} \right) \langle G^R G^A \rangle = \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} \quad (6.60)$$

și introducînd compresibilitatea izotermă χ^T prin:

$$\chi^T = N(0) \quad (6.61)$$

funcția de răspuns densitate devine:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \omega \cdot \Phi(\vec{q}, \omega) + \chi^T \quad (6.62)$$

Pentru $\vec{q} = 0$ (limita lungimilor de undă infinite), funcția de răspuns densitate este zero. Acest rezultat este o consecință a conservării numărului de particule. Atunci:

$$\chi(\vec{q} = 0, \omega) \equiv 0 = \omega \cdot \Phi(\vec{q} = 0, \omega) + \chi^T$$

deci:

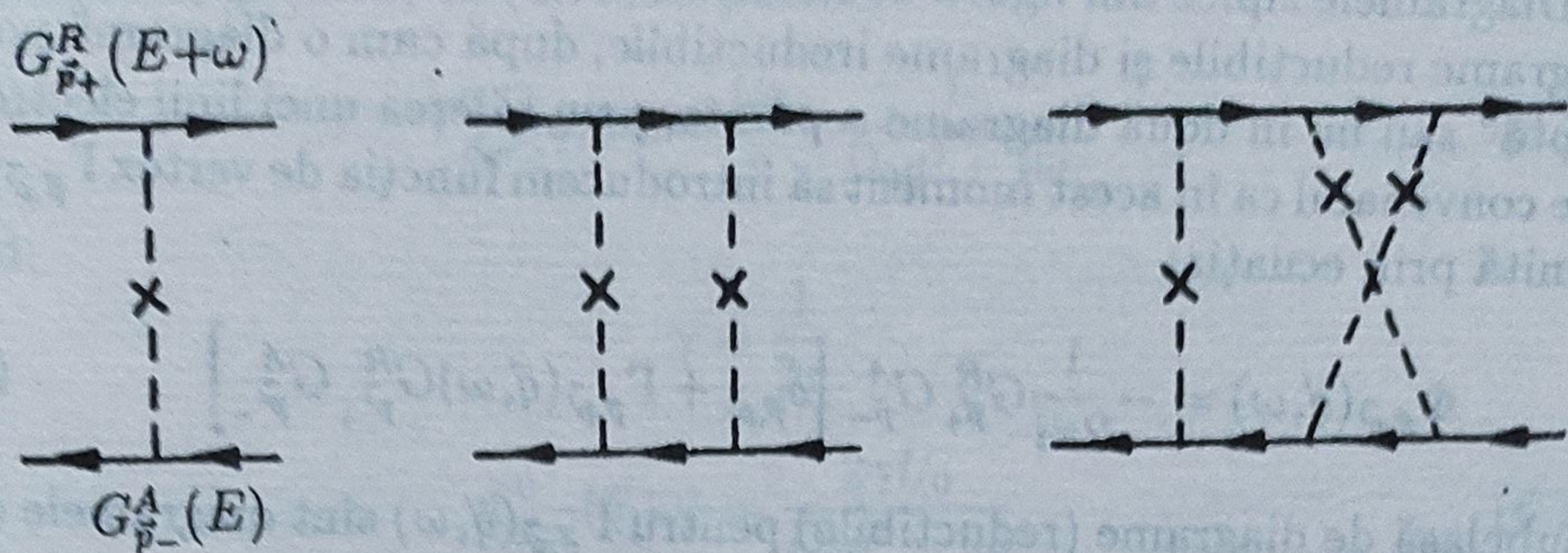
$$\Phi(0, \omega) = -\frac{\chi^T}{\omega} \quad (6.63)$$

care diverge în limita $\omega \rightarrow 0$. Din (6.62) găsim $\Phi(\vec{q}, \omega)$:

$$\Phi(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\omega} [\chi(\vec{q}, \omega) - \chi^T] \quad (6.64)$$

care este tocmai funcția de relaxare Kubo (1.77).

Considerăm în continuare interacția dintre electroni și impurități, pentru a determina $\langle G^R G^A \rangle$ din (6.60). Diagramele tipice care contribuie la $\langle G^R G^A \rangle$ sînt următoarele:



Aici linia punctată corespunde interacției electron-impuritate, fiindu-i asociat un factor:

$$U_0(\vec{p} - \vec{p}') = n_i |U(\vec{p} - \vec{p}')|^2 \quad (6.65)$$

unde n_i este concentrația de impurități, iar $U(\vec{p})$ este transformata Fourier a potențialului de împrăștiere. $G_{\vec{p}}^{R,A}$ sînt funcțiile Green uniparticulă (cu medierea pe impurități), asociate liniilor continue. Ele sînt date de relațiile (v. și Cap.IV):

$$G_{\vec{p}}^R = \left[\epsilon_F + \omega - \frac{p^2}{2m} - \Sigma_{\vec{p}}^R(\epsilon_F + \omega) \right]^{-1} \quad (6.66)$$

$$G_{\vec{p}}^A = \left[\epsilon_F - \frac{p^2}{2m} - \Sigma_{\vec{p}}^A(\epsilon_F) \right]^{-1} \quad (6.67)$$

unde $\Sigma_{\vec{p}}^{R,A}$ sînt self-energii. În aproximația Born de ordinul întâi:

$$\gamma \equiv \text{Im} \Sigma_{p_F}^A(\epsilon_F) \simeq \pi N(0) \int \frac{d\Omega_{\vec{p}'}}{4\pi} \cdot U_0(\vec{p}_F - \vec{p}'_F) \quad (6.68)$$

în care putem face aproximația $U_0(\vec{p} - \vec{p}') = U_0$, dacă centrii de împrăștiere sînt punctiforme, iar potențialul de împrăștiere este de scurtă rază de acțiune. Atît timp cît concentrația de impurități este mică, γ este mult mai mic decît energia particulelor, astfel încît mărimile fizice sînt funcții slab dependente de dezordine, densitatea de stări de exemplu fiind foarte puțin modificată. Acesta este motivul pentru care expresiile perturbative (în ordinul cel mai scăzut) pentru G^R și G^A , date de (6.66) și (6.67) cu (6.68), sînt suficiente pentru a vedea comportamentul singular în ω a funcției de corelație densitate.

Diagramele tipice din figura de mai sus pot fi clasificate în două categorii. Diagrame reductibile și diagrame ireductibile, după cum o diagramă poate fi "ruptă" sau nu în două diagrame separate, prin tăierea unei linii electronice. Este convenabil ca în acest moment să introducem funcția de vertex $\Gamma_{\vec{p},\vec{p}'}(\vec{q},\omega)$ definită prin ecuația:

$$\Phi_{\vec{p},\vec{p}'}(\vec{q},\omega) = -\frac{1}{2\pi i} G_{\vec{p}+}^R G_{\vec{p}-}^A \left[\delta_{\vec{p},\vec{p}'} + \Gamma_{\vec{p},\vec{p}'}(\vec{q},\omega) G_{\vec{p}'+}^R G_{\vec{p}'-}^A \right] \quad (6.69)$$

O subclasă de diagrame (reductibile) pentru $\Gamma_{\vec{p},\vec{p}'}(\vec{q},\omega)$ sînt diagramele de tip ladder:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\vec{p},\vec{p}'}^0(\vec{q},\omega) &= \begin{array}{c} \vec{p}_+ \quad \vec{p}'_+ \\ \hline \Gamma^0 \\ \hline \vec{p}_- \quad \vec{p}'_- \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \times \quad \times \quad \times \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \quad | \\ \times \quad \times \quad \times \quad \times \\ | \quad | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ \times \quad \times \quad \times \quad \times \quad \times \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \dots = \\ &= \begin{array}{c} | \\ | \\ | \\ | \\ | \end{array} \times + \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \\ \times \quad \times \quad \times \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \Gamma^0 = U_0 + U_0 \Gamma_{\vec{p},\vec{p}'}^0(\vec{q},\omega) \sum_{\vec{p}} G_{\vec{p}+}^R G_{\vec{p}-}^A \quad (6.70) \end{aligned}$$

De aici:

$$\Gamma_{\vec{p},\vec{p}'}^0(\vec{q},\omega) = \frac{U_0}{1 - U_0 \sum_{\vec{p}} G_{\vec{p}+}^R G_{\vec{p}-}^A} \quad (6.71)$$

Suma din (6.71) este tocmai $\Pi(\vec{q},\omega)$ calculat în Cap.IV și este dat de (4.63):

$$\Pi(\vec{q},\omega) = \sum_{\vec{p}} G_{\vec{p}+}^R G_{\vec{p}-}^A \simeq 2\pi N(0)\tau \left[1 - D_0 q^2 \tau + i\omega\tau \right] \quad (6.72)$$

În aproximația Born, cu (6.65), inversul timpului de relaxare, dat de (4.37), este:

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi N(0)U_0 \quad (6.73)$$

Folosind (6.72) și (6.73) în (6.71) obținem:

$$\Gamma_{\vec{p},\vec{p}'}^0(\vec{q},\omega) = \frac{U_0}{\tau} \cdot \frac{1}{D_0 q^2 - i\omega} \quad (6.74)$$

Notînd:

$$\gamma = \frac{1}{2\tau}$$

avem:

$$\Gamma_{\vec{p},\vec{p}'}^0(\vec{q},\omega) = \frac{2\gamma U_0}{D_0 q^2 - i\omega} \quad (6.75)$$

Vedem că pentru $q, \omega \rightarrow 0$, Γ^0 prezintă un pol difuziv. Existența lui este o consecință a legii de conservare a numărului de particule. Γ^0 se mai numește și **propagator difuziv**, iar $D_0 = \epsilon_F / m\gamma d$ este coeficientul de difuzie în d -dimensiuni.

Pentru a determina funcția de răspuns densitate folosim ecuația Bethe-Salpeter pentru $\Phi_{\vec{p},\vec{p}'}$:

$$\Phi_{\vec{p},\vec{p}'}(\vec{q},\omega) = G_{\vec{p}+}^R G_{\vec{p}-}^A \left[-\frac{1}{2\pi i} \delta(\vec{p} - \vec{p}') + \sum_{\vec{p}''} U_{\vec{p},\vec{p}''}(\vec{q},\omega) \Phi_{\vec{p}'',\vec{p}'}(\vec{q},\omega) \right] \quad (6.76)$$

Aici $U_{\vec{p},\vec{p}''}$ conține toate contribuțiile ireductibile la funcția de vertex. Folosind identitatea:

$$G_{\vec{p}+}^R G_{\vec{p}-}^A = \frac{G_{\vec{p}-}^A - G_{\vec{p}+}^R}{(G_{\vec{p}+}^R)^{-1} - (G_{\vec{p}-}^A)^{-1}} \quad (6.77)$$

relațiile (6.66) și (6.67), avem:

$$\begin{aligned} (G_{\vec{p}+}^R)^{-1} - (G_{\vec{p}-}^A)^{-1} &= \omega - \frac{1}{2m} \left((\vec{p}+)^2 - (\vec{p}-)^2 \right) - \Sigma^R + \Sigma^A \simeq \\ &\simeq \omega - \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} - \Sigma^R + \Sigma^A \end{aligned} \quad (6.78)$$

termenii pătratici în \vec{q} fiind neglijabil de mici. Introducînd apoi notația:

$$\Delta G_{\vec{p}} = G_{\vec{p}+}^R - G_{\vec{p}-}^A \quad (6.79)$$

ecuația (6.77) devine:

$$G_{\vec{p}+}^R G_{\vec{p}-}^A = -\frac{\Delta G_{\vec{p}}}{\omega - \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} - \Sigma^R + \Sigma^A} \quad (6.80)$$

Folosind (6.80) în (6.76) obținem imediat:

$$\begin{aligned} \omega \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'}(\vec{q}, \omega) - \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'}(\vec{q}, \omega) - [\Sigma_{\vec{p}+}^R(\epsilon_F + \omega) - \Sigma_{\vec{p}-}^A(\epsilon_F)] \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'}(\vec{q}, \omega) = \\ = \frac{1}{2\pi i} \Delta G_{\vec{p}} \delta(\vec{p} - \vec{p}') - \sum_{\vec{p}''} \Delta G_{\vec{p}} U_{\vec{p}, \vec{p}''}(\vec{q}, \omega) \Phi_{\vec{p}'', \vec{p}'}(\vec{q}, \omega) \end{aligned} \quad (6.81)$$

Cu ajutorul identității Ward, valabilă pentru orice \vec{q} și ω :

$$\Sigma_{\vec{p}+}^R(\epsilon_F + \omega) - \Sigma_{\vec{p}-}^A(\epsilon_F) = \sum_{\vec{p}''} U_{\vec{p}, \vec{p}''}(\vec{q}, \omega) \Delta G_{\vec{p}''} \quad (6.82)$$

ținînd seama că:

$$U_{\vec{p}'', \vec{p}} = U_{\vec{p}, \vec{p}''}$$

și sumînd (6.81) după \vec{p} și \vec{p}' , vom avea:

$$\omega \Phi(\vec{q}, \omega) - q \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}} \Delta G_{\vec{p}} \quad (6.83)$$

cu: $\hat{q} = \vec{q}/q$. Partea dreaptă a ecuației (6.83) se scrie astfel:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}} \Delta G_{\vec{p}} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}} (G^R - G^A) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}} (G^R - (G^R)^*) = \\ = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\vec{p}} (Re G^R + i \cdot Im G^R - Re G^R + i \cdot Im G^R) = \frac{1}{\pi} \sum_{\vec{p}} Im G^R = -N(0) \end{aligned} \quad (6.84)$$

Definind funcția de relaxare curent $\Phi_j(\vec{q}, \omega)$ prin:

$$\Phi_j(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'}(\vec{q}, \omega) \quad (6.85)$$

obținem:

$$\omega \Phi(\vec{q}, \omega) - q \Phi_j(\vec{q}, \omega) = -N(0) \quad (6.86)$$

Pentru a găsi funcția de relaxare densitate $\Phi(\vec{q}, \omega)$ trebuie determinată în prealabil funcția $\Phi_j(\vec{q}, \omega)$. Rescriem (6.81) sub forma:

$$\left[\omega - \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} - \Sigma^R + \Sigma^A \right] \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} = \Delta G_{\vec{p}} \left[\frac{1}{2\pi i} \delta(\vec{p} - \vec{p}') - \sum_{\vec{p}''} U_{\vec{p}, \vec{p}''} \Phi_{\vec{p}'', \vec{p}'} \right] \quad (6.87)$$

cu:

$$\Sigma^R - \Sigma^A = -i\gamma - (i\gamma) = -2i\gamma \quad (6.88)$$

Atunci avem:

$$(\omega + 2i\gamma)\Phi_{\vec{p},\vec{p}'} - \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m}\Phi_{\vec{p},\vec{p}'} = \Delta G_{\vec{p}} \left[\frac{1}{2\pi i}\delta(\vec{p} - \vec{p}') - \sum_{\vec{p}''} U_{\vec{p},\vec{p}''}\Phi_{\vec{p}'',\vec{p}'} \right] \quad (6.89)$$

Inmulțind (6.89) cu $\vec{p} \cdot \hat{q}/m$ și sumând relația obținută peste \vec{p} și \vec{p}' , obținem:

$$\begin{aligned} & (\omega + 2i\gamma) \sum_{\vec{p},\vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p},\vec{p}'} - \sum_{\vec{p},\vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p},\vec{p}'} = \\ & = \sum_{\vec{p},\vec{p}'} \frac{\Delta G_{\vec{p}}}{2\pi i} \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \delta(\vec{p} - \vec{p}') - \sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{p}''} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} U_{\vec{p},\vec{p}''} \Phi_{\vec{p}'',\vec{p}'} \Delta G_{\vec{p}} \end{aligned} \quad (6.90)$$

Vedem cele două contribuții din partea dreaptă a ec.(6.90). Prima este:

$$\sum_{\vec{p},\vec{p}'} \frac{\Delta G_{\vec{p}}}{2\pi i} \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \delta(\vec{p} - \vec{p}') = \sum_{\vec{p}} \frac{\Delta G_{\vec{p}}}{2\pi i} \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} = 0 \quad (6.91)$$

după cum poate fi ușor verificat trecînd de la sumă la integrală. A doua contribuție va fi scrisă astfel:

$$\sum_{\vec{p},\vec{p}',\vec{p}''} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} U_{\vec{p},\vec{p}''} \Phi_{\vec{p}'',\vec{p}'} \Delta G_{\vec{p}} = \sum_{\vec{p},\vec{p}''} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} U_{\vec{p},\vec{p}''} \Delta G_{\vec{p}} \sum_{\vec{p}'} \Phi_{\vec{p}'',\vec{p}'} \quad (6.92)$$

Notăm:

$$F(\vec{p}'') = \sum_{\vec{p}'} \Phi_{\vec{p}'',\vec{p}'} \quad (6.93)$$

Dezvoltăm $\Phi_{\vec{p}'',\vec{p}'}$ după variabilele unghiulare și ținem seama că $ImG_{\vec{p}}$ este o funcție avînd un maxim pronunțat la $|\vec{p}| = p_F$. Atunci avem:

$$\begin{aligned} F(\vec{p}'') &= A + B \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{p \cdot q} \simeq A + B \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{p_F} \simeq \\ &\simeq -\frac{\Delta G_{\vec{p}''}}{2\pi i N(0)} \sum_{\vec{p}',\vec{p}_1} \left[1 + d \cdot \frac{(\vec{p}'' \cdot \hat{q})(\vec{p}_1 \cdot \hat{q})}{p_F^2} \right] \Phi_{\vec{p}_1,\vec{p}'} \end{aligned} \quad (6.94)$$

Folosind (6.91), (6.92) și (6.94) în (6.90) obținem:

$$\begin{aligned}
 & (\omega + 2i\gamma) \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} - \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} = \\
 & = \sum_{\vec{p}, \vec{p}''} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} U_{\vec{p}, \vec{p}''} \Delta G_{\vec{p}} \frac{\Delta G_{\vec{p}''}}{2\pi i N(0)} \sum_{\vec{p}', \vec{p}_1} \left[1 + d \cdot \frac{(\vec{p}'' \cdot \hat{q})(\vec{p}_1 \cdot \hat{q})}{p_F^2} \right] \Phi_{\vec{p}_1, \vec{p}'} \quad (6.95)
 \end{aligned}$$

Despărțind termenul din dreapta în două contribuții observăm, din nou, că prima contribuție este nulă datorită integralei unghiulare. Atunci (6.95) devine:

$$\begin{aligned}
 & (\omega + 2i\gamma) \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} - \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} = \\
 & = -i \frac{d}{2\pi p_F^2 N(0)} \sum_{\vec{p}, \vec{p}', \vec{p}'', \vec{p}_1} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} U_{\vec{p}, \vec{p}''} \Delta G_{\vec{p}} \Delta G_{\vec{p}''} (\vec{p}'' \cdot \hat{q})(\vec{p}_1 \cdot \hat{q}) \Phi_{\vec{p}_1, \vec{p}'} \quad (6.96)
 \end{aligned}$$

Scriem cel de-al doilea termen din membrul stîng astfel:

$$\sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} \cdot \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} = \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{q p_F^2}{m^2 d} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} = q \frac{2\epsilon_F}{m d} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} \quad (6.97)$$

avînd:

$$\begin{aligned}
 & (\omega + 2i\gamma) \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} + \frac{id}{2\pi p_F^2 N(0)} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}'', \vec{p}_1} (\vec{p}_1 \cdot \hat{q}) U_{\vec{p}_1, \vec{p}''} \Delta G_{\vec{p}_1} \Delta G_{\vec{p}''} (\vec{p}'' \cdot \hat{q}) \cdot \\
 & \cdot \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} - q \frac{2\epsilon_F}{m d} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'} = 0 \quad (6.98)
 \end{aligned}$$

care se rescrie în felul următor:

$$[\omega + M(\vec{q}, \omega)] \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\vec{p} \cdot \hat{q}}{m} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'}(\vec{q}, \omega) - q \frac{2\epsilon_F}{m d} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \Phi_{\vec{p}, \vec{p}'}(\vec{q}, \omega) = 0 \quad (6.99)$$

cu $M(\vec{q}, \omega)$ funcția de memorie, exprimată prin:

$$M(\vec{q}, \omega) = 2i\gamma + \frac{id}{2\pi p_F^2 N(0)} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} (\vec{p} \cdot \hat{q}) \Delta G_{\vec{p}} U_{\vec{p}, \vec{p}'} \Delta G_{\vec{p}'} (\vec{p}' \cdot \hat{q}) \quad (6.100)$$

(unde s-au făcut renotările $\vec{p}'' \rightarrow \vec{p}$, $\vec{p}_1 \rightarrow \vec{p}'$). Cu (6.85) și (6.60), (6.99) devine:

$$[\omega + M(\vec{q}, \omega)] \Phi_j(\vec{q}, \omega) - q \frac{2\epsilon_F}{md} \Phi(\vec{q}, \omega) = 0 \quad (6.101)$$

Ecuatiile (6.86) și (6.101) formează un sistem. Eliminînd $\Phi_j(\vec{q}, \omega)$ și folosind compresibilitatea izotermă $\chi^T = N(0)$, obținem pentru funcția de relaxare densitate următoarea expresie:

$$\Phi(\vec{q}, \omega) = - \frac{\chi^T [\omega + M(\vec{q}, \omega)]}{\omega^2 + \omega M(\vec{q}, \omega) - 2\epsilon_F q^2 / md} \quad (6.102)$$

Funcția de răspuns densitate $\chi(\vec{q}, \omega)$ se calculează acum ușor, înlocuind (6.102) în (6.62), obținînd:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = - \frac{2\epsilon_F \chi^T q^2 / md}{\omega^2 + \omega M(\vec{q}, \omega) - 2\epsilon_F q^2 / md} \quad (6.103)$$

Tinînd seama că:

$$\frac{2\epsilon_F}{d} = \frac{n}{N(0)} \equiv \frac{n}{\chi^T} \quad (6.104)$$

unde n este concentrația de electroni, avem:

$$\frac{2\epsilon_F}{md} = \frac{n}{m\chi^T} \quad (6.105)$$

și (6.103) devine:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = - \frac{(n/m) q^2}{\omega^2 + \omega M(\vec{q}, \omega) - (n/m\chi^T) q^2} \quad (6.106)$$

În limita frecvențelor scăzute, neglijăm termenul ω^2 în (6.106), avînd:

$$\chi(\vec{q}, \omega) \simeq - \frac{(n/m) q^2}{M(\vec{q}, \omega) [\omega - n q^2 / m\chi^T M(\vec{q}, \omega)]} \quad (6.107)$$

Definim coeficientul de difuzie generalizat $D(\vec{q}, \omega)$ prin:

$$D(\vec{q}, \omega) = \frac{i}{(m/n)\chi^T M(\vec{q}, \omega)} \quad (6.108)$$

Exprimînd concentrația de electroni n din (6.108) și înlocuind expresia obținută în (6.107) avem:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \chi^T \frac{iD(\vec{q}, \omega)q^2}{\omega + iD(\vec{q}, \omega)q^2} \quad (6.109)$$

Conductivitatea dinamică $\sigma(\omega)$ se obține folosind $\chi(\vec{q}, \omega)$, dat de ec.(6.106), și legătura (v.problema 3.4):

$$\sigma(\omega) = e^2 \cdot \lim_{q \rightarrow 0} \left(-\frac{i\omega}{q^2} \right) \cdot \chi(\vec{q}, \omega) \quad (6.110)$$

Atunci imediat:

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \cdot \frac{i}{\omega + M(0, \omega)} \equiv \frac{ne^2}{m} \cdot \frac{i}{\omega + M(\omega)} \quad (6.111)$$

În limita cuplajului slab și a frecvențelor scăzute, funcția de memorie este (din (6.100)):

$$M(0, \omega \rightarrow 0) \equiv M(0, 0) = 2i\gamma = 2i \cdot \frac{1}{2\tau} = \frac{i}{\tau} \quad (6.112)$$

cu care conductivitatea dinamică devine:

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m} \cdot \frac{1}{1 - i\omega\tau} = \frac{\sigma}{1 - i\omega\tau} \quad (6.113)$$

adică tocmai formula Drude pentru un conductor.

Dacă luăm în considerare cazul împrăstierilor înapoi, vom obține (în ordinul cel mai scăzut) următoarea expresie pentru funcția de memorie (Vollhardt și Wölfle, Katsnelson și Sadovskii):

$$M(\omega) = \frac{i}{\tau} - 2U_0 \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\omega + iD_0q^2} = \frac{i}{\tau} \left[1 + \frac{1}{\pi N(0)} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{-i\omega + D_0q^2} \right] \quad (6.114)$$

Trecînd de la sumă la integrală, în ec.(6.114), vom avea de calculat integrale de forma:

$$I(\omega) = \int dq \frac{q^{d-1}}{\omega + iD_0q^2}$$

Pentru $d \leq 2$, și în limita $\omega \rightarrow 0$, $I(\omega)$ are următorul comportament:

$$I(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\omega}} & , d = 1 \\ \ln \omega & , d = 2 \end{cases} \quad (6.115)$$

Se observă atunci că $M(0, \omega)$, dat de ec.(6.114), prezintă singularitate de tip infraroșu (de frecvențe mici), pentru $d \leq 2$. Atunci, în conformitate cu (6.108), coeficientul de difuzie este puternic modificat, deci va trebui să folosim $D(\vec{q}, \omega)$ (expresia self-consistentă) în locul lui D_0 în membrul drept al relației (6.114). Vom folosi deci (6.108):

$$D(\vec{q}, \omega) = \frac{i}{(m/n)\chi^T M(\vec{q}, \omega)} = \frac{iD_0}{\tau M(\vec{q}, \omega)} \quad (6.116)$$

Aici am mai folosit:

$$D_0 = \frac{v_F^2 \tau}{d} = \frac{2\epsilon_F \tau}{md} = \frac{n\tau}{m\chi^T} \quad (6.117)$$

Inlocuind $D(\omega)$ în (6.114) obținem expresia self-consistentă pentru funcția de memorie:

$$M(\omega) = \frac{i}{\tau} \left[1 + \frac{i}{\pi N(0)} \sum_q \frac{1}{\omega - D_0 q^2 \tau^{-1} [M(\omega)]^{-1}} \right] \quad (6.118)$$

Ecuția (6.118) poate fi rezolvată în limita frecvențelor scăzute, iar pentru $d \leq 2$ se găsește expresia:

$$M(\omega) = \frac{i}{\tau} - \frac{\omega_0^2}{\omega} \quad (6.119)$$

Aici ω_0 este scala de frecvență pentru care efectele de localizare devin importante:

$$\omega_0 \sim \begin{cases} (k_F l)^{-1} & , d = 1 \\ e^{-\pi k_F l} & , d = 2 \end{cases} \quad (6.120)$$

Din (6.119) se observă că $M(0, \omega)$ diverge ca $-1/\omega$ atunci când $\omega \rightarrow 0$. Inlocuind (6.119) în (6.111) avem:

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2 \tau}{m} \cdot \frac{1}{1 - i\tau(\omega - \omega_0^2/\omega)} \quad (6.121)$$

de unde imediat (pentru frecvențe mici):

$$Re\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m\tau} \cdot \frac{\omega^2}{\omega_0^4 + \omega^2/\tau^2} \quad (6.122)$$

Observăm că, forma (6.119) pentru funcția de memorie, conduce la o conductivitate dependentă de frecvență, care în limita $\omega \rightarrow 0$ este zero. Deci, comportamentul de tipul (6.121), în limita $\omega \rightarrow 0$, corespunde unui **izolator**. Putem concluziona atunci că, pentru $\omega \gg \omega_0$ conductivitatea este nenulă, apoi (pentru un sistem bidimensional) descrește logaritmice, iar în final trece în regimul localizat, pentru $\omega \ll \omega_0$.

Folosind (6.116) și (6.118) obținem pentru coeficientul de difuzie generalizat expresia:

$$\frac{D_0}{D(\omega)} = 1 + \frac{1}{\pi N(0)} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{-i\omega + D(\omega)q^2} \quad (6.123)$$

Pentru cazul cu $M(\omega)$ dat de ec.(6.119), coeficientul de difuzie $D(\omega)$ este (din (6.116)):

$$D(\omega) = \frac{iD_0}{\tau M(\omega)}$$

iar funcția de răspuns densitate devine:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = N(0) \frac{iD(\omega)q^2}{\omega + iD(\omega)q^2} = N(0) \frac{D_0q^2}{D_0q^2 - \omega\tau M(\omega)}$$

sau:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = N(0) \frac{D_0q^2}{D_0q^2 + \omega_0^2\tau - i\omega} \quad (6.124)$$

Dacă $\omega_0 = 0$, ecuația (6.124) se reduce la forma hidrodinamică obișnuită. În regiunea de localizare, definim lungimea de localizare ξ_{loc} prin relația:

$$\omega_0^2\tau = D_0\xi_{loc}^{-2} \quad (6.125)$$

iar de aici:

$$\xi_{loc} = \frac{1}{\omega_0} \sqrt{\frac{D_0}{\tau}} = \frac{1}{\omega_0} \sqrt{\frac{2\epsilon_F}{md}} \quad (6.126)$$

În acest caz funcția de răspuns densitate, pentru $\omega = 0$, devine:

$$\chi(\vec{q}, 0) = N(0) \frac{q^2}{q^2 + \xi_{loc}^{-2}} \quad (6.127)$$

Putem observa imediat (v.ec.(6.119)) că tranziția în starea localizată este semnalată de divergența lui $M(\omega)$ atunci când $\omega \rightarrow 0$, iar frecvența ω_0 poate fi considerată analogul parametrului de ordine din teoria tranzițiilor de fază. Frecvența caracteristică ω_0 poate fi definită (prin funcția de memorie $M(\omega)$) astfel:

$$\omega_0^2 = - \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega M(\omega) > 0 \quad (6.128)$$

Dacă energia nu este fixată la $E = \epsilon_F$, frecvența caracteristică $\omega_0^2 = \omega_0^2(E)$, datorită dependenței de E a funcției de memorie (Sadovskii 1999). Rezultatul (6.119) este valabil pentru $\epsilon_F < \epsilon_c$, unde ϵ_c este energia corespunzătoare pragului de mobilitate (v.Cap.IV). Poziția pragului de mobilitate se determină atunci cu ajutorul ecuației:

$$\omega_0^2(\epsilon_c) = 0 \quad (6.129)$$

Pragul de mobilitate și ipoteza scaling

În Cap.IV am stabilit că funcția de scaling $\beta(g)$ (definită prin ec.(4.100)), pentru cazul tridimensional și în vecinătatea punctului fix, are forma (4.105):

$$\beta(g) = \frac{1}{\nu} \cdot \frac{g - g_3}{g_3} \equiv \frac{1}{\nu} \cdot \delta g$$

iar pentru $g > g_3$, ceea ce corespunde părții metalice, avem:

$$g(L) = \sigma \cdot L \quad (6.130)$$

unde:

$$\sigma = \frac{A \cdot g_3}{l} (\delta g)^\nu \equiv \frac{g_3}{\xi}$$

iar L este dimensiunea probei. În apropierea pragului de mobilitate,

$$\xi = \frac{l}{A} \left(\frac{g - g_3}{g_3} \right)^{-\nu} \rightarrow \infty$$

astfel încît numai probele de dimensiune $L \gg \xi$ pot fi considerate drept macroscopice. În apropierea pragului de mobilitate singura dimensiune relevantă (cu excepția dimensiunii L a probei) este ξ , iar ipoteza scaling este echivalentă cu considerarea următoarei forme pentru conductanța adimensională:

$$g(L) = f\left(\frac{L}{\xi}\right) \quad (6.131)$$

unde $f(x)$ este o funcție universală (pentru o dimensionalitate d dată). În regiunea metalică, unde $L \gg \xi \gg l$, și pentru $d = 3$, este evident că:

$$f(x) \sim x \quad (6.132)$$

care reproduce relația (6.130). În general în d dimensiuni:

$$f(x) \sim x^{d-2} \quad (6.133)$$

În cazul în care câmpul electric exterior are frecvența ω , definim o nouă lungime caracteristică:

$$L_\omega = \left[\frac{D(\omega)}{\omega} \right]^{1/2} \quad (6.134)$$

unde $D(\omega)$ este coeficientul de difuzie dependent de frecvență. L_ω este lungimea de difuzie a electronului în decursul unei perioade a câmpului exterior. În apropierea pragului de mobilitate, ξ este mare, iar pentru $L_\omega < \xi$, L și L_ω devin lungimi de scală relevante. Atunci, pentru cazul frecvențelor finite, ipoteza scaling (6.131) poate fi generalizată la:

$$g(L, \omega) = f\left(\frac{L}{\xi}, \frac{L_\omega}{\xi}\right) \quad (6.135)$$

unde g reprezintă partea reală a conductanței. Pe partea metalică și în d dimensiuni, conductivitatea σ poate fi scrisă sub forma:

$$\sigma = \frac{e^2}{\hbar} \cdot \frac{g_3}{\xi^{d-2}} \quad (6.136)$$

Pentru $L \gg \xi$, $g \sim L^{d-2}$, astfel încît $\sigma(\omega)$ este:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{\hbar} \cdot L^{2-d} g(L, \omega) = \frac{e^2}{\hbar} \cdot L^{2-d} f\left(\frac{L}{\xi}, \frac{L_\omega}{\xi}\right) \rightarrow$$

$$\rightarrow \sigma(\omega) = \frac{e^2}{h} \cdot \xi^{2-d} f\left(\infty, \frac{L_\omega}{\xi}\right) \equiv \frac{e^2}{h} \cdot \xi^{2-d} F\left(\frac{\xi}{L_\omega}\right) \quad (6.137)$$

În cazul frecvențelor scăzute, când $L_\omega \gg \xi$, funcția universală $F(x)$ are forma:

$$F(x) \approx g_3 + B \cdot x^{d-2} \quad (6.138)$$

Ea reproduce forma dată de ec.(6.135), plus o corecție de frecvențe mici.

Pentru $L_\omega \ll \xi$ (cazul frecvențelor mari, sau al apropierii de pragul de mobilitate), lungimea relevantă este L_ω , astfel încât este dominantă partea dependentă de frecvență a conductivității. În particular, la pragul de mobilitate, ξ nu mai apare în (6.135), ceea ce conduce la următorul comportament al conductivității:

$$\sigma(\omega, \epsilon_c) \sim L_\omega^{2-d} \sim \left[\frac{\omega}{D(\omega)} \right]^{(d-2)/2} \quad (6.139)$$

În acord însă cu relația lui Einstein, trebuie să avem:

$$\sigma(\omega, \epsilon_c) \sim D(\omega) \quad (6.140)$$

Comparînd (6.140) cu (6.139) tragem concluzia că $D(\omega) \sim \omega^{(d-2)/d}$, astfel încît:

$$\sigma(\omega, \epsilon_c) \sim D(\omega) \sim \omega^{\frac{d-2}{d}} \quad (6.141)$$

Pentru $d = 3$ avem (Wegner, 1976):

$$\sigma(\omega) \sim D(\omega) \sim \omega^{1/3} \quad (6.142)$$

Trecerea spre un alt tip de dependență de frecvență a conductivității are loc la o frecvență de trecere ω_c , care se determină din condiția:

$$L_\omega \sim \xi \quad (6.143)$$

și conduce la rezultatul (Shapiro, Abrahams, 1981):

$$\omega_c \sim \frac{1}{h\xi^d N(0)} \quad (6.144)$$

Comportamentul de tipul $\omega^{(d-2)/d}$ se realizează pentru $\omega \gg \omega_c$, iar pentru $\omega \ll \omega_c$ se găsesc corecții mici, de ordinul $\omega^{(d-2)/2}$, la formula (6.136). Aici

mai trebuie să menționăm că la temperaturi finite apar împrăstieri **inelastice**, care distrug coerența de fază a funcțiilor de undă la distanțe mai mari decît o lungime caracteristică $L_i = \sqrt{D\tau_i}$, unde D este coeficientul de difuzie datorat împrăstierilor elastice, iar τ_i timpul de dispariție a coerenței de fază (datorită ciocnirilor inelastice). Pentru $T > 0$, cînd $L \gg L_i$, lungimea L_i înlocuiește dimensiunea L a probei în toate relațiile teoriei scaling, deoarece la distanțe mai mari decît L_i toată informația legată de natura funcțiilor de undă (de ex. localizate sau extinse) este pierdută. Dacă luăm în considerare că la temperaturi scăzute:

$$\tau_i \sim T^{-p} \quad (6.145)$$

(p -număr a cărui valoare depinde de mecanismul de împrăstiere inelastică considerat), vom obține anumite dependențe de temperatură (netriviale) ale conductivității, în particular existînd posibilitatea unui coeficient de temperatură negativ pentru rezistivitate, în cazul metalelor impure care se află în apropierea tranziției spre starea localizată (Imry, 1980).

Probleme

6.1 Justificați relația (6.58).

6.2 Folosind expresia coeficientului de difuzie generalizat, dată de ec.(6.123), arătați că pentru un sistem bidimensional și în limita frecvențelor mici, conductivitatea dinamică $\sigma(\omega)$ este dată de relația:

$$\sigma(\omega) = -i\omega C [2N(0)e^2 q_c^{-2}]$$

unde:

$$C = \exp\left(\frac{2\pi^2\sigma_0}{e^2}\right) - 1$$

iar q_c este un impuls superior de tăiere.

6.3 Pentru un sistem tridimensional, arătați că expresia conductivității

statice $\sigma(0)$ poate fi exprimată astfel:

$$\sigma(0) = \sigma_0 \left(1 - \frac{\sigma_c}{\sigma_0}\right), \text{ pentru } \sigma_0 > \sigma_c$$

unde: $\sigma_c = e^2 q_c / \pi^3$, iar q_c un impuls superior de tăiere.

6.4 Calculați expresia conductivității electrice, în limita $\omega \rightarrow 0$, în prezența dezordinii, introdusă prin parametrul $\lambda = 1/(2\pi\epsilon_F\tau)$, și în prezența unui câmp magnetic H , mergînd pînă la corecțiile de ordinul doi în H .

6.5 Pentru un sistem unidimensional și în prezența impurităților, funcția de memorie poate fi scrisă sub forma:

$$M(\omega) = \frac{\gamma_0}{nm} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \cdot q^2 \tilde{C}(q) \frac{\Pi(q, \omega + i0) - \Pi(q, i0)}{\omega + i0}$$

unde, în prezența interacțiilor:

$$\Pi(q, \omega) = Z_q \frac{2\omega_q}{\omega_q^2 - \omega^2}$$

cu:

$$Z_q = \frac{|q|}{\pi\sqrt{1+F}} \quad \omega_q = \tilde{v}_F |q| \quad \tilde{v}_F = v_F \sqrt{1+F}$$

și unde F este parametrul de interacție. γ_0 este un parametru care măsoară tăria dezordinii, n este concentrația de electroni, iar $\tilde{C}(q)$ este dat de relația:

$$\tilde{C}(q) = \eta(1 - |q|\xi)$$

($\eta(x)$ -este funcția treaptă). Arătați că în limita frecvențelor scăzute ($|\omega| \ll \tilde{v}_F/\xi$) conductivitatea dinamică are un comportament de forma:

$$\sigma(\omega) \sim \frac{1}{\Gamma(\omega) - i\omega \frac{m^*(\omega)}{m}}$$

unde:

$$\Gamma(\omega) = a\omega^2 \quad \frac{m^*(\omega)}{m} = 1 + b + O(\omega^2)$$

Determinați expresiile constantelor a și b .

Apendix

Evaluarea sumei dată de ec.(5.81):

Avem de calculat suma:

$$S = T \sum_{n'} \frac{1}{i\omega_{n'} - z'} \cdot \frac{1}{i(\omega_n - \omega_{n'}) - z} \equiv T \sum_{n'} F(i\omega_{n'}) \quad (\text{A.1})$$

cu $F(\omega)$ o funcție analitică, cu excepția unor poli simplii, în planul complex.
In cazul fermionilor:

$$\omega_{n'} = \frac{2\pi}{\beta} \left(n' + \frac{1}{2} \right), \quad \beta = \frac{1}{T} \quad (\text{A.2})$$

Considerăm funcția $g(\tilde{z})$:

$$g(\tilde{z}) = F(\tilde{z}) \cdot f(\tilde{z}), \quad f(\tilde{z}) = \frac{1}{e^{\beta\tilde{z}} + 1} \quad (\text{A.3})$$

Acestă funcție este analitică, cu excepția punctelor unde $F(\tilde{z})$ are poli și unde:

$$e^{\beta\tilde{z}} + 1 = 0 \quad (\text{A.4})$$

In (A.4), dacă scriem $\tilde{z} = i\omega_{n'}$, avem:

$$e^{i\beta\omega_{n'}} = -1$$

sau:

$$\cos(\beta\omega_{n'}) + i \cdot \sin(\beta\omega_{n'}) = -1$$

Este evident că trebuie să avem:

$$\cos(\beta\omega_{n'}) = -1$$

de unde:

$$\beta\omega_{n'} = \pi(2n' + 1) \rightarrow \omega_{n'} = \frac{2\pi}{\beta} \left(n' + \frac{1}{2} \right), \quad n' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

deci:

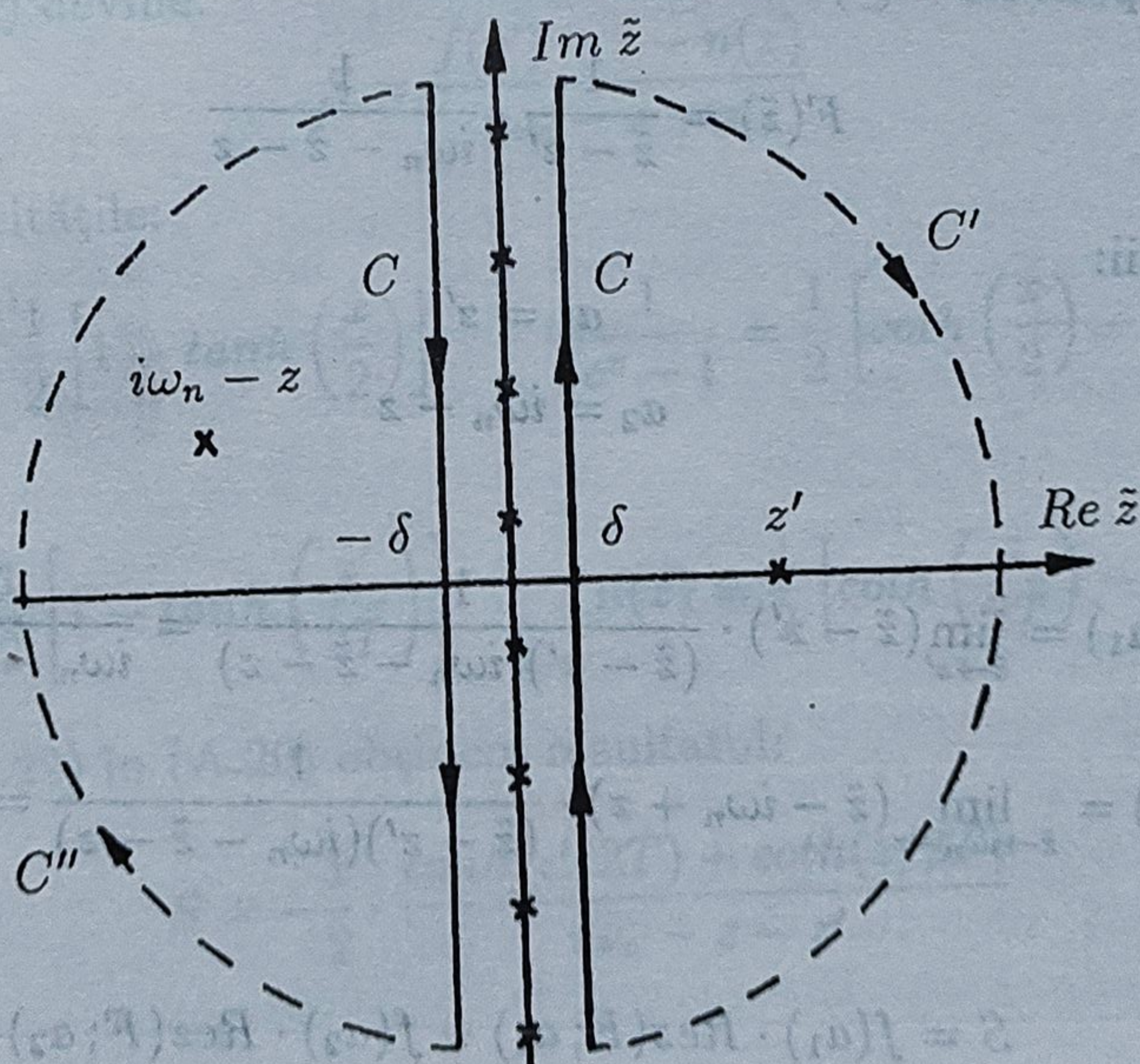
$$\tilde{z} = i\omega_{n'}$$

(A.5)

cu $\omega_{n'}$ dat de (A.2). Dacă funcția $F(\tilde{z})$ nu are poli care să coincidă cu cei dați de (A.5), atunci $g(\tilde{z})$ are poli simplii în aceste puncte. Rezidurile în acești poli sînt date de relațiile:

$$\begin{aligned} \text{Rez}(g; i\omega_{n'}) &= \lim_{\tilde{z} \rightarrow i\omega_{n'}} (\tilde{z} - i\omega_{n'}) \cdot \frac{F(\tilde{z})}{e^{\beta\tilde{z}} + 1} = \\ &= \lim_{\tilde{z} \rightarrow i\omega_{n'}} (\tilde{z} - i\omega_{n'}) \cdot \frac{F(\tilde{z})}{e^{i\beta\omega_{n'}} e^{\beta(\tilde{z} - i\omega_{n'})} + 1} = \\ &= \lim_{\tilde{z} \rightarrow i\omega_{n'}} (\tilde{z} - i\omega_{n'}) \cdot \frac{F(\tilde{z})}{[(-1) \left(1 + \beta(\tilde{z} - i\omega_{n'}) + \frac{\beta^2}{2}(\tilde{z} - i\omega_{n'})^2 + \dots \right)] + 1} = \\ &= \lim_{\tilde{z} \rightarrow i\omega_{n'}} (\tilde{z} - i\omega_{n'}) \cdot \frac{F(\tilde{z})}{-\beta(\tilde{z} - i\omega_{n'}) - \frac{\beta^2}{2}(\tilde{z} - i\omega_{n'})^2 - \dots} = \\ &= \lim_{\tilde{z} \rightarrow i\omega_{n'}} (\tilde{z} - i\omega_{n'}) \cdot \frac{F(\tilde{z})}{-\beta(\tilde{z} - i\omega_{n'}) \left[1 + \frac{\beta}{2}(\tilde{z} - i\omega_{n'}) + \dots \right]} = -\frac{1}{\beta} \cdot F(i\omega_{n'}) \quad (A.6) \end{aligned}$$

Poli lui $g(\tilde{z})$ sînt reprezentați în figura de mai jos:



Dacă C este un contur care înconjoară doar polii lui $g(\tilde{z})$ care nu sînt poli a lui $F(\tilde{z})$, avem:

$$\int_C d\tilde{z} \cdot F(\tilde{z}) \cdot f(\tilde{z}) = 2\pi i \sum_{n'} \text{Rez}(g; i\omega_{n'}) \quad (\text{A.7})$$

sau:

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_C d\tilde{z} \cdot F(\tilde{z}) \cdot f(\tilde{z}) = T \sum_{n'} F(i\omega_{n'}) \equiv S \quad (\text{A.8})$$

Conturul C constă în două linii la $\text{Re}\tilde{z} = \delta$ și la $\text{Re}\tilde{z} = -\delta$. Totuși, integrala din (A.8) poate fi deasemenea evaluată formînd contururi de integrare închise prin semiplanele $\text{Re}\tilde{z} > 0$ și $\text{Re}\tilde{z} < 0$. Acestea sînt semicercurile C' și C'' din figură. Dacă este îndeplinită condiția:

$$\lim_{|\tilde{z}| \rightarrow \infty} |\tilde{z} \cdot g(\tilde{z})| = 0 \quad (\text{A.9})$$

integralele de-a lungul acestor semicercuri tind la zero atunci cînd raza lor tinde la infinit și, deoarece contururile sînt parcurse în sensul acelor de ceasornic, avem:

$$S = \sum_a f(a) \cdot \text{Rez}(F; a) \quad (\text{A.10})$$

unde a sînt polii lui $F(\tilde{z})$. În cazul nostru:

$$F(\tilde{z}) = \frac{1}{\tilde{z} - z'} \cdot \frac{1}{i\omega_n - \tilde{z} - z} \quad (\text{A.11})$$

care are polii:

$$\begin{aligned} a_1 &= z' \\ a_2 &= i\omega_n - z \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Atunci:

$$\text{Rez}(F; a_1) = \lim_{\tilde{z} \rightarrow z'} (\tilde{z} - z') \cdot \frac{1}{(\tilde{z} - z')(i\omega_n - \tilde{z} - z)} = \frac{1}{i\omega_n - z' - z} \quad (\text{A.13})$$

$$\text{Rez}(F; a_2) = \lim_{\tilde{z} \rightarrow i\omega_n - z} (\tilde{z} - i\omega_n + z) \cdot \frac{1}{(\tilde{z} - z')(i\omega_n - \tilde{z} - z)} = -\frac{1}{i\omega_n - z' - z} \quad (\text{A.14})$$

și:

$$S = f(a_1) \cdot \text{Rez}(F; a_1) + f(a_2) \cdot \text{Rez}(F; a_2)$$

sau:

$$S = \frac{f(z') - f(i\omega_n - z)}{i\omega_n - z' - z} \quad (\text{A.15})$$

Mai observăm că:

$$\begin{aligned} f(i\omega_n \pm z) &= \frac{1}{e^{\beta(i\omega_n \pm z)} + 1} = \frac{1}{e^{i\beta\omega_n} e^{\pm\beta z} + 1} = \\ &= \frac{1}{-e^{\pm\beta z} + 1} = -\frac{1}{e^{\pm\beta z} - 1} = -n(\pm z) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

unde:

$$n(z) = \frac{1}{e^{\beta z} - 1} \quad (\text{A.17})$$

este funcția Bose. Deci:

$$f(i\omega_n - z) = -n(-z)$$

Cum însă:

$$n(-z) = -1 - n(z) \quad (\text{A.18})$$

avem:

$$f(i\omega_n - z) = 1 + n(z) \quad (\text{A.19})$$

și S din (A.15) devine:

$$S = \frac{f(z') - 1 - n(z)}{i\omega_n - z - z'} \quad (\text{A.20})$$

Folosind identitățile:

$$\frac{1}{e^x + 1} = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{x}{2}\right) \right] \quad \frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{2} \left[\coth\left(\frac{x}{2}\right) - 1 \right] \quad (\text{A.21})$$

avem:

$$f(z') = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{z'}{2T}\right) \right] \quad n(z) = \frac{1}{2} \left[\coth\left(\frac{z}{2T}\right) - 1 \right] \quad (\text{A.22})$$

Inlocuind (A.22) în (A.20) obținem rezultatul:

$$S = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\tanh(z'/2T) + \coth(z/2T)}{i\omega_n - z - z'} \quad (\text{A.23})$$

Bibliografie

- [1] P.M.Chaikin, T.C.Lubensky, "Principles of condensed matter physics" Cambridge University Press, (1995)
- [2] L.P.Kadanoff, P.C.Martin, Ann.Phys.24, 419, (1963)
- [3] D.Belitz, T.R.Kirkpatrick, Rev.Mod.Phys.66, 261, (1994)
- [4] S.Chandrasekhar, Rev.Mod.Phys.15, 1, (1943)
- [5] A.N.Tihonov, A.A.Samarski, "Ecuațiile fizicii matematice", Ed.Tehnică, București, (1956)
- [6] P.Langevin, Comptes Rendus Acad.Sci.Paris 146, 530, (1908)
- [7] R.Kubo, M.Toda, N.Hashitsume, "Statistical Physics II", 2nd.ed. Springer-Verlag, Berlin, (1978)
- [8] N.G.van Kampen, J.Math.Phys.4, 190, (1963)
- [9] K.Huang, "Statistical Mechanics", 2nd.ed. Wiley, New York, (1987)
- [10] N.W.Aschcroft, N.D.Mermin, "Solid State Physics", Saunders, Philadelphia, (1976)
- [11] F.J.Blatt, în "Solid State Physics", vol.4, F.Seitz and D.Turnbull editors, Academic Press, NY, (1957), p.199
- [12] M.C.W.van Rossum, Th.M.Nieuwenhuizen, Rev.Mod.Phys.71, 267, (1999)
- [13] G.Rickayzen, "Green's functions and condensed matter", Academic Press, London, (1980)
- [14] J.S.Langer, T.Neal, Phys.Rev.Lett.16, 984, (1966)
- [15] B.L.Altshuler, A.G.Aronov, D.E.Khmelnitskii, A.I.Larkin, în "Quantum Theory of Solids", I.M.Lifshits editor, Mir Publishers, Moskow, (1982), p.130
- [16] G.Bergmann, Phys.Repts.107, 1, (1984)
- [17] A.A.Abrikosov, L.P.Gorkov, I.E.Dzyaloshinski, "Methods of quantum field theory in statistical physics", Dover Publ. New York, (1975)
- [18] T.R.Kirkpatrick, D.Belitz, Phys.Rev.B 34, 2168, (1986)
- [19] J.Friedel, Can.J.Phys.39, 1190, (1956)
- [20] P.W.Anderson, Phys.Rev.124, 41, (1961)
- [21] P.Wolff, Phys.Rev.124, 1030, (1961)
- [22] J.Kondo, Progr.Theor.Phys.32, 37, (1964)

- [23] R.N.Bhatt, D.S.Fisher, Phys.Rev.Lett.68, 3072, (1992)
- [24] P.W.Anderson, Phys.Rev.109, 1492, (1958)
- [25] N.F.Mott, Adv.Phys.16, 49, (1967)
- [26] D.J.Thouless, Phys.Repts.13, 94, (1974)
- [27] E.Abrahams, P.W.Anderson, D.C.Licciardello, T.V.Ramakrishnan, Phys.Rev.Lett.42, 673, (1979)
- [28] P.A.Lee, T.V.Ramakrishnan, Rev.Mod.Phys.57, 287, (1985)
- [29] A.F.Ioffe, A.R.Regel, Prog.Semicond.4, 237, (1960)
- [30] G.Giuliani, J.J.Quinn, Phys.Rev.B 29, 2321, (1984)
- [31] J.Bardeen, L.N.Cooper, J.R.Schrieffer, Phys.Rev.108, 1175, (1957)
- [32] P.B.Allen, B.Mitrovic, in "Solid State Physics", vol.37, F.Seitz, D.Turnbull, H.Ehrenreich editors, Academic Press, NY, (1982), p.1
- [33] P.W.Anderson, J.Phys.Chem.Solids 11, 26, (1959)
- [34] A.A.Abrikosov, L.P.Gorkov, JETP 39, 1781, (1961)
- [35] G.M.Eliashberg, JETP 38, 966, (1960)
- [36] A.B.Migdal, JETP 34, 1438, (1958)
- [37] D.J.Scalapino, J.R.Schrieffer, J.M.Wilkins, Phys.Rev.148, 263, (1966)
- [38] Y.Nambu, Phys.Rev.117, 648, (1960)
- [39] M.Crişan, "Theory of superconductivity", World Scientific, Singapore, (1989)
- [40] W.L.McMillan, Phys.Rev.167, 331, (1968)
- [41] T.Tsuneto, Phys.Rev.21, 402, (1960)
- [42] A.Schmid, Z.Phys.259, 421, (1973)
- [43] B.Keck, A.Schmid, Solid State Commun.17, 79, (1975); J.Low Temp. Phys.24, 611, (1976)
- [44] P.W.Anderson, K.A.Muttalib, T.V.Ramakrishnan, Phys.Rev.B 28, 117, (1983)
- [45] L.N.Bulaevskii, M.V.Sadovskii, J.Low Temp.Phys.59, 89, (1985)
- [46] C.R.Leavens, Phys.Rev.B 31, 6072, (1985)
- [47] N.F.Berk, J.R.Schrieffer, Phys.Rev.Lett.17, 433, (1966)
- [48] S.Doniach, S.Engelsberg, Phys.Rev.Lett.17, 750, (1966)
- [49] G.Gladstone, M.A.Jensen, J.R.Schrieffer, in "Superconductivity", R.D.Parks editor, Dekker-New York, (1969), p.665
- [50] I.Grosu, T.Vereş, M.Crişan, J.Supercond.5, 159, (1992)
- [51] J.Friedel, Phil.Mag.43, 153, (1952)
- [52] A.L.Fetter, Phys.Rev.140, A1921, (1965)

- [53] M.E.Zhitomirski, M.B.Walker, Phys.Rev.Lett.80, 5413, (1998)
- [54] G.Kotliar et.al., Europhys.Lett.6, 1996, (1989)
- [55] G.Kotliar, C.M.Varma, Physica A 167, 288, (1990)
- [56] C.M.Varma, P.B.Littlewood, S.Schmitt-Rink, E.Abrahams, A.E.Ruckenstein, Phys.Rev.Lett.63, 1996, (1989)
- [57] Y.Ando et.al., Phys.Rev.Lett.75, 4662, (1995)
- [58] G.Boebinger et.al., Phys.Rev.Lett.77, 5417, (1996)
- [59] C.M.Varma, Phys.Rev.Lett.79, 1535, (1997)
- [60] G.Grimvall, "The electron-phonon interaction in metals", North Holland, Amsterdam, (1981)
- [61] D.M.Newns et.al., Comments Cond.Mat.Phys.15, 273, (1992)
- [62] J.Labbe, J.Bok, Europhys.Lett.3, 1225, (1987)
- [63] R.S.Markiewicz et.al., Solid State Commun.67, 43, (1988)
- [64] V.N.Muthukumar, D.Sa, M.Sardar, Phys.Rev.B 52, 9647, (1995)
- [65] D.J.Kim, Phys.Repts.171, 129, (1988)
- [66] C.Esebbag, M.de Llano, R.M.Carter, in "Condensed Matter Theories", vol.8, L.Blum and F.B.Malik editors, Plenum Press, New York, (1993), p.45
- [67] I.Grosu, J.Supercond.7, 959, (1994)
- [68] W.Götze, P.Wölfle, Phys.Rev.B 6, 1226, (1972)
- [69] D.Pines, P.Nozieres, "The theory of quantum liquids", vol.1, Benjamin, New York, (1966)
- [70] D.Vollhardt, P.Wölfle, Phys.Rev.B 22, 4666, (1980)
- [71] M.I.Katsnelson, M.V.Sadovskii, JETP 87, 523, (1984)
- [72] M.V.Sadovskii, cond-mat/9308018 v3, (1999)
- [73] F.J.Wegner, Z.Phys.B 25, 327, (1976)
- [74] B.Shapiro, E.Abrahams, Phys.Rev.B 24, 4889, (1981)
- [75] Y.Imry, Phys.Rev.Lett.44, 469, (1980)
- [76] I.Sadakata, J.Phys.Soc.Japan 54, 736, (1985); 55, 3991, (1986)
- [77] D.Yoshioka, Y.Ono, H.Fukuyama, J.Phys.Soc.Japan 50, 3419, (1981)
- [78] P.Kopietz, G.E.Castilla, Phys.Rev.B 59, 9961, (1999)

CUPRINS

I. FUNCTII DE CORELATIE SI RASPUNS	1
Funcții de răspuns	4
Oscilatorul armonic	10
Oscilatorul neamortizat	10
Oscilatorul amortizat	11
Funcția de răspuns	13
Disipația	18
Difuzia	19
Legea lui Fick	19
Funcția Green și răspunsul dinamic	21
Funcția de răspuns	24
Proprietățile formale a funcțiilor de răspuns	29
Răspunsul la câmpuri externe	29
Proprietăți de simetrie a funcțiilor de răspuns	33
Disipația	35
Reprezentări spectrale pentru $\chi''_{\phi_i \phi_j}$	38
Teorema fluctuație-disipație	41
Probleme	43
II. TEORIA LANGEVIN	50
Probleme	59
III. CONDUCTIBILITATEA ELECTRICA	61
Probleme	69
IV. DIFUZIA CUANTICA. TEORIA LOCALIZARII	71
Teoria împrăstierilor. Matricea "t"	71
Ecuația Schrödinger în prezența impurităților	73
Funcția Green în sistemele dezordonate	77
Timpul de ciocnire	79
Difuzia cuantică	82
Dezordinea în sisteme cu momente magnetice locale	98
Problema Kondo în prezența dezordinii	100
Teoria scaling a localizării	103
Funcția de scaling	105
Consecințele teoriei scaling	107

Probleme	111
V. SUPRACONDUCTIBILITATE SI DEZORDINE	114
Teoria BCS	114
Temperatura critică. Criteriul Thouless	115
Impurități nemagnetice. Teorema Anderson	119
Impurități paramagnetice. Formula Abrikosov-Gorkov	121
Supraconductori cu cuplaj puternic. Ecuațiile Eliashberg	125
Cuplajul electron difuziv-fonon	143
Interacția coulombiană în prezența dezordinii	144
Influența fluctuațiilor de spin	149
Efectul oscilațiilor Friedel	158
Impurități în sisteme ne-fermionice	159
Probleme	165
VI. TRANZITIA METAL-IZOLATOR	173
Funcția de memorie	173
Pragul de mobilitate și ipoteza scaling	193
Probleme	196
Appendix	198
Bibliografie	202